

# OBSTRELJEVANJE TRDNIH SNOVI Z IONI

## I. TEORETIČNI OPIS RAZPRŠEVANJA

Nastja Mahne, Matjaž Panjan

Institut »Jožef Stefan«, Jamova 39, 1000 Ljubljana

ZNANSTVENI ČLANEK

### POVZETEK

Ionsko obstreljevanje trdnih snovi je pomemben postopek pri obdelavi površin, analitskih tehnikah ter različnih tehnoloških postopkih in znanstvenih raziskavah. Glavni namen ionskega obstreljevanja je odstranjevanje atomov s površine. Na ta način čistimo površine, analiziramo globinsko sestavo snovi ali razpršujemo atome z namenom, da pripravimo tanke plasti. Prispevek je razdeljen na dva dela. V prvem delu predstavljamo teoretično ozadje razprševanja ter fizikalne procese, ki potekajo na atomskem nivoju ob trku iona s snovjo. Ko ion trči v snov, njegovo gibanje določajo jedrske in elektronske sile. Ion z dovolj veliko energijo v snovi premakne atome iz ravnovesnih leg, ti pa nato povzročajo nadaljnje trke. Ta proces opišemo s trkovnimi kaskadami, ki jih podrobneje predstavljamo v tem prispevku. Tiste trkovne kaskade, ki so usmerjene proti površini, lahko nekaterim atomom omogočijo, da zapustijo snov. Razpršeni atomi imajo tako različne energije in izstopijo iz snovi v različnih smereh. Za naprševanje tankih plasti je pomembno, da poznamo energijo razpršenih atomov. V članku izpeljemo funkcijo, ki opisuje energijsko porazdelitev razpršenih atomov. S pomočjo te funkcije smo raziskali vpliv različnih parametrov (energije in mase vpadnih ionov ter vrste razprševane snovi) na energijo atomov po izstopu iz snovi. Drugi del članka bomo posvetili simulacijam razprševanja atomov. Podrobneje bomo predstavili simulacije, ki temeljijo na aproksimaciji binarnih trkov. S takšnimi simulacijami bomo izračunali različne parametre, ki so pomembni za razprševanje.

**Ključne besede:** ionsko obstreljevanje, razprševanje, naprševanje, energijska porazdelitev razpršenih atomov

### Ion bombardment of solids: I. Theoretical description of sputtering

#### ABSTRACT

Ion bombardment of solids is an important process in surface treatment, analytical techniques, technological processes and scientific research. Often, the primary purpose of ion bombardment is the removal of atoms from the surface. In this way, we clean the surfaces, analyze the depth composition of a material, or sputter atoms from solids to deposit various types of thin films. This work is divided into two parts. In the first part, we present theoretical approaches for the description of sputtering and explain physical processes that take place at the atomic level when an ion collides with a solid. At such a collision, the motion of the atom is determined by nuclear and electronic forces. An ion with sufficient energy can displace atoms from their equilibrium positions. These atoms can then cause further collisions. This process is described as collision cascades and is presented in more detail. Those collision cascades that are directed toward the surface enable some atoms to leave the solid. The sputtered atoms have different energies and emerge from a solid in different directions. For the deposition of thin films, it is important to identify the energy of the sputtered atoms. In the paper, we derive an analytical function for the energy distribution of sputtered atoms. Using this function, we investigated the influence of various parameters (energy of ions, mass of ions and type of sputtered material) on the energy of sputtered atoms. The second part of the paper will be focused on the simulations of the sputtering process. We will present simulations that are based on the approximation of binary collisions and use them to calculate various sputtering parameters.

**Keywords:** ion bombardment, sputtering, energy distribution of sputtered atoms

## 1 UVOD

Obstreljevanje površin trdnih snovi z ioni je postopek, ki se pogosto uporablja v različnih vejah znanosti in tehnoloških procesih. Pri znanstvenih raziskavah ionsko obstreljevanje uporabljamo na primer pri površinskih analitskih tehnikah, pri tehnoloških procesih pa je pomemben korak za proizvodnjo integriranih vezij, optičnih tankih plasti, sončnih celic, trdnih prevlek in drugih proizvodov. Ionsko obstreljevanje je poglobitveni del postopkov ionskega jedkanja, razprševanja in naprševanja. Ti trije izrazi so povezani z enakimi fizikalnimi procesi, uporabljajo pa se glede na namen ionskega obstreljevanja [1]. Izraz ionsko jedkanje poudarja, da je glavni namen postopka odstranjevanje materiala s površine. Izraza razprševanje in naprševanje pa uporabljamo, kadar govorimo o postopkih, pri katerih je glavni cilj nanašanje tankih plasti. Z ionskim obstreljevanjem material razpršujemo s tarče in ga napršujemo na podlage. Uporaba teh dveh izrazov je torej odvisna od tega, ali govorimo o tarči ali o podlagi.

Kadar ion z veliko energijo trči ob površino tarče, povzroči različne procese. Poleg razprševanja atomov pride tudi do sekundarne emisije elektronov, ionske implantacije, sipanja ionov in segrevanja tarče. V članku se bomo osredotočili le na proces razprševanja atomov.

Ionsko jedkanje oz. razprševanje je odvisno od vrste obstreljevanega materiala ter od energije, mase, gostote toka in vpadnega kota ionov. Da pride do znatnega razprševanja obstreljevanega materiala, morajo imeti ioni energijo vsaj nekaj 100 eV. Takšne ione pridobimo iz različnih virov plazme. Pri analizi površin je vir ionov najpogosteje ionska puška [2, 3]. Snop ionov izhaja iz plazme znotraj ionske puške. Nastanek ionov je tako prostorsko ločen od obdelovanega materiala. Ioni iz ionske puške imajo dobro definirano energijo, njihov vpadni kot na površino je natančno določen, tok ionov pa lahko spreminjamo v relativno širokem obsegu. Z ionskimi puškami lahko zelo precizno kontroliramo jedkanje površin, vendar smo omejeni na manjše površine.

Kadar je nastanek plazme povezan z obdelovanim materialom, lahko obdelujemo večje površine, vendar

težje neodvisno kontroliramo energijo ionov, gostoto toka ionov in njihovo prostorsko porazdelitev. Pri magnetronskem naprševanju ione pridobimo iz plazme, ki jo ustvarimo tako, da na material (tj. tarčo, ki jo razpršujemo) priključimo električno napetost pri nizkem tlaku inertnega plina (najpogosteje argona). Gostota plazme je odvisna od napetosti na tarči, materiala tarče, vrste in tlaka plina ter drugih parametrov.

Jedkanje površin z ioni iz ionske puške se najpogosteje uporablja v znanosti o površinah kot del različnih analitskih tehnik. Takšne tehnike so na primer spektroskopija Augerjevih elektronov (AES), rentgenska fotoelektronska spektroskopija (XPS) in sekundarna ionska masna spektrometrija (SIMS) [4]. V prvih dveh tehnikah z ioni najprej odstranimo nekaj atomskih plasti, nato pa analiziramo sestavo površine vzorca. Če takšno analizo ponavljamo v korakih, dobimo t. i. globinske profile, ki nam razkrijejo sestavo vzorca po globini. Pri sekundarni ionski masni spektrometriji [5] z ioni iz ionske puške obstreljujemo analizirani material ter z masnim spektrometrom detektiramo ione, ki izhajajo iz materiala. Tudi s to tehniko lahko dobimo globinsko sestavo vzorca. Pri omenjenih tehnikah je premer snopa ionov iz ionske puške relativno širok, tipično premera nekaj 10  $\mu\text{m}$ . Pri fokusiranem ionskem curku (FIB) [6], ki je vgrajen v vrstični elektronski mikroskop (SEM), pa je premer ionskega snopa iz ionske puške lahko le nekaj nanometrov. Najpogosteje se v tehniki FIB uporabljajo galijevi ioni. Tehnika FIB nam omogoča odstranjevanje materiala z nanometrsko natančnostjo, zato lahko naredimo analizo mikrostrukture in sestave na zelo majhnem območju. Tehnika FIB se uporablja ne le za prerez materiala, ampak tudi za pripravo vzorcev za presevalno elektronsko mikroskopijo (TEM), ustvarjanje različnih nanometrskih struktur ter za druge namene [7].

Ionsko jedkanje je eden pomembnejših korakov v mikroelektroniki pri izdelavi procesorjev, elektronskih vezij ter drugih komponent [8]. V tem primeru izvor ionov ni ionska puška, saj ta ne omogoča enakomerne ionske obdelave na večjem področju, kot je npr. silicijeva rezina (premer nekaj deset centimetrov). Za ionsko jedkanje silicijevih rezin se uporabljajo reaktivni plini (npr.  $\text{SF}_6$ ) v kapacitivno ali induktivno sklopljeni plazmi. Parametre teh plazem lahko v veliki meri kontroliramo neodvisno od silicijevih podlag.

V povezavi z ionskim jedkanjem lahko omenimo tudi ionsko implantacijo, kjer v material vgrajujemo posamezne vrste ionov. Ta postopek je zelo pomemben pri različnih tehnoloških postopkih, povezanih s proizvodnjo polprevodnikov (npr. dopiranje polprevodnikov tipa p ali n) [9]. Ionska implantacija se pogosto uporablja tudi za izboljšanje funkcionalnih

lastnosti površin materialov (npr. nitriranje jekel). V tem članku se bomo osredotočili predvsem na razprševanje materialov z ioni in ne na implantacijo ionov v materiale.

Naprševanje je fizikalni postopek, ki omogoča nanašanje tankih plasti večine elementov periodnega sistema. Pri naprševanju ione pridobimo iz plazme, ki jo ustvarimo z negativno električno napetostjo (nekaj sto voltov) na tarči v atmosferi inertnega plina pri tlaku okrog 1 Pa. Pozitivni ioni se v električnem polju, ki je usmerjeno proti tarči, pospešijo do visoke energije in trčijo v material tarče. Iz materiala izbijejo atome, ki se nato odložijo na podlage in tvorijo tanko plast. Najbolj razširjena tehnika naprševanja je magnetronsko naprševanje [10, 11]. Ta tehnika omogoča največje hitrosti razprševanja zaradi močnega magnetnega polja, ki ga ustvarjajo magneti, postavljeni za tarčo. Tipično je velikost magnetnega polja blizu površine tarče okrog 0,1 T. Takšno magnetno polje ustvari zelo gosto plazmo in tako poveča hitrost razprševanja (oz. naprševanja). Da lahko ustvarimo plazmo in dobimo kakovostne ter čiste plasti, mora naprševanje potekati pri nizkem tlaku (tipično okrog 1 Pa). Če hkrati v vakuumsko komoro uvajamo še reaktivne pline (npr. kisik, dušik, metan), lahko pripravimo tudi številne binarne ali večkomponentne spojine. Hkrati lahko razpršujemo več različnih materialov, kar nam omogoča sintezo neomejenega števila različnih večplastnih in kompozitnih materialov. Magnetronsko naprševanje je zelo razširjena tehnika, ki se pogosto uporablja za nanašanje tankih plasti v različnih tehnoloških področjih: npr. v mikroelektroniki (kovinske in difuzijske plasti za tiskana vezja, spominski elementi), optiki (optični filtri, antirefleksne plasti, plasti za arhitekturna stekla), inženirstvu površin (trde obrabno obstojne prevleke za orodja in strojne dele) ter drugih sodobnih tehnoloških področjih.

Ionsko obstreljevanje je torej ključno na mnogih znanstvenih in tehnoloških področjih. V tem prispevku ne bomo opisovali različnih tehnik ionskega obstreljevanja površin, ampak se bomo osredotočili na fizikalne procese, ki potekajo na atomskem nivoju, ko ion trči v trdno snov in potuje skozi njo. V prvem delu članka bomo podrobneje opisali interakcije med ionom in snovjo ter nastanek trkovnih kaskad. Izpeljali bomo analitično funkcijo, ki opisuje energijsko porazdelitev razpršenih atomov. Ta funkcija nam bo omogočila, da raziščemo različne vplive na proces razprševanja. Raziskali bomo odvisnost energijske porazdelitve razpršenih atomov od energije in vrste vpadnih ionov ter vrste razprševanega materiala. V drugem delu članka pa bomo predstavili računalniške programe za simuliranje prodiranja iona v snovi in razprševanje atomov. S simulacijami bomo izračunali

razpršitveni koeficient in energijo razpršenih atomov v odvisnosti od različnih parametrov.

## 2 INTERAKCIJA MED VPADNIM IONOM IN TRDNO SNOVJO

Preden opišemo razprševanje atomov, bomo predstavili fizikalne procese, ki potekajo na atomskem nivoju pri prodiranju iona v trdno snov. Opis v nadaljevanju velja za kristalinične, polikristalinične in amorfne trdne snovi.

Preden ion trči v snov, se lahko nevtralizira in postane atom. Ko je pozitiven ion blizu površine snovi, med njim in površino nastane zelo močno električno polje. To polje zmanjša bariero za tuneliranje elektronov, zato lahko elektron iz trdne snovi »preskoči« do iona in ga nevtralizira. Proces imenujemo Augerjeva nevtralizacija [12]. V tem primeru pride do interakcije med vpadnim atomom in trdo snovjo. V nadaljevanju bomo za opis prodiranja nabitega iona oz. nevtralnega atoma v snov raje uporabljali izraz delec, vendar bomo izraz ion uporabljali, kadar bomo želeli vpadni delec ločiti od ostalih atomov v snovi.

Fizikalno ozadje, ki opisuje interakcije med prodirajočim delcem in snovjo, je obsežno, kompleksno in vključuje uporabo kvantne mehanike. Interakcije bomo zato opisali na kratko in predstavili le fizikalne osnove. Ko delec vstopi v snov, na njegovo gibanje in kinetično energijo vpliva več sil oz. interakcij. Na prodirajoči delec vplivajo interakcije med jedrom prodirajočega delca in jedri atomov trdne snovi ter interakcije med elektroni prodirajočega delca in elektroni atomov v snovi [13–15]. Prve interakcije so elastične, druge pa neelastične.

Pri jedrskih oz. elastičnih interakcijah gre za lokalizirano izgubo energije, saj je interakcija znatna le, ko se gibajoči delec močno približa posameznemu jedru atoma v snovi. Interakcijo opišemo z jedrskim potencialom med jedroma; najpogosteje s senčenim Coulombskim potencialom. Pri elastičnih interakcijah se delcem, ki so udeleženi v trku, gibalna količina in kinetična energija močno spremenita, celotna gibalna količina in energija sistema pa se ohranjata. Z elastičnimi trki se na atome v snovi prenese velik del energije vpadnega delca, atomi v kristalni strukturi zato lahko zapustijo ravnovesne lege in se gibljejo naprej po snovi ter trkajo z drugimi atomi. Elastični trki med jedri so glavni mehanizem, ki povzroča razprševanje.

Neelastične oz. elektronske interakcije pa lahko ločimo na zvezne in nezvezne. Zvezne izgube energije izhajajo iz interakcije s prostimi elektroni v snovi (Fermijev plin), nezvezne izgube pa zaradi interakcij z vezanimi elektroni. Interakcijo med elektroni potujočega delca in Fermijevim elektronskim plinom si

lahko predstavljamo kot trenje znotraj snovi, ki zaustavlja potujoči delec; ali drugače: plin prostih elektronov na gibajoči se delec vpliva kot viskozna snov. Pri tej vrsti interakcije so energijske izgube sorazmerne s hitrostjo delca (oz. s kvadratnim korenom kinetične energije gibajočega se delca). Ta način upadanja energije delca je torej zvezen (oz. linearen), saj se odvija ves čas, ko delec prodira skozi snov. Pri zveznih neelastičnih energijskih izgubah prodirajoči delec izgublja energijo, vendar pa se mu smer gibanja ne spreminja. Nezvezne izgube energije potekajo zaradi interakcije med elektroni gibajočega se delca in vezanimi elektroni v snovi ter so pomembnejše pri zelo visokih energijah vpadnega delca (tj. več 10 keV). Pri teh interakcijah prihaja do ionizacije in vzbujanja elektronov, tako v snovi kot tudi v prodirajočem delcu. Te energijske izgube so za razliko od prej opisanih linearnih izgub lokalizirane, saj do njih pride, ko se elektronska oblaka prodirajočega delca in atoma v snovi prekrivata.

Vpadni delec, ki prodira v snov, torej izgublja energijo zaradi interakcij z jedri in z elektroni. Energijske izgube delca opisuje funkcija zavorne moči  $S$ , ki je definirana kot izguba energije delca  $E$  na enoto prepotovane poti  $x$ :

$$S(E) = -\frac{dE}{dx} \quad (1)$$

Zavorna moč je odvisna od energije in vrste vpadnega delca ter od snovi, skozi katero prodira ion. Za različne kombinacije ionov in snovi je zavorna moč določena eksperimentalno in teoretično [16]. Zavorno moč lahko razdelimo na jedrsko zavorno moč ( $S_n$ ) in elektronsko zavorno moč ( $S_e$ ):

$$S(E) = S_n(E) + S_e(E) \quad (2)$$

Če poznamo odvisnost zavorne moči od energije, potem lahko izračunamo povprečno pot, ki jo delec z začetno kinetično energijo  $E_0$  prepotuje v snovi:

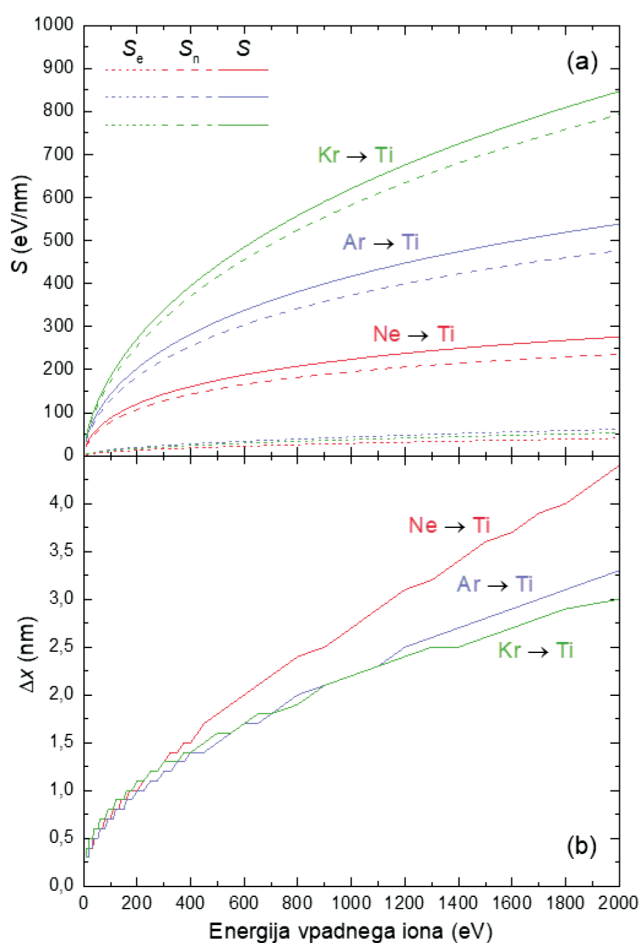
$$\Delta x = \int_0^{E_0} \frac{1}{S(E)} dE \quad (3)$$

**Slika 1a** prikazuje jedrsko, elektronsko ter celotno zavorno moč za prodiranje neonovih, argonovih in kriptonovih ionov v titan. Prikazano je področje energij do 2000 eV. Vidimo, da v tem energijskem področju na energijo delca vplivajo predvsem jedrske interakcije, medtem ko je vpliv elektronskih interakcij precej manjši, vendar ne povsem zanemarljiv. Argonov ion z energijo 1000 eV v povprečju izgubi okoli 415 eV, ko v titanu prepotuje 1 nm, od tega 370 eV izgubi zaradi jedrskih interakcij, 45 eV pa zaradi elektronskih interakcij. Izgube energije zaradi elektronskih interakcij so za red velikosti nižje kot zaradi jedrskih interakcij, vendar se delež elektronskih inte-



rakcij povečuje z zmanjševanjem energije prodirajočega iona. Pri lahkih ionih – na primer tistih, ki nastajajo v jedrskih reakcijah in trkajo ob stene jedrskega reaktorja, pa je elektronska zavorna moč primerljiva oz. večja kot jedrska zavorna moč. Za helijeve ione, ki prodirajo v titan, je elektronska zavorna moč večja od jedrske zavorne moči že pri 500 eV. Pri težjih ionih pa elektronske izgube pričnejo prevladovati pri višjih energijah. Pri prodiranju neonovega iona v titan je ta meja približno 50 keV, pri argonu okrog 150 keV, pri ksenonu pa 2 MeV [16]. Pri postopkih naprševanja, kjer uporabljamo težje ione (najpogosteje argonove) in energije pod 2000 eV, je vpliv elektronskih izgub na energijo in gibalno količino delca precej manjši kot zaradi jedrskih izgub.

Pomembna je tudi globina, do katere prodre ion. **Slika 1b** prikazuje povprečno prosto pot, ki jo neonovi, argonovi in ksenonovi ioni v povprečju prepotujejo v titanu. Vidimo lahko, da argonov ion z energijo 1000 eV prepotuje okrog 2 nm, z energijo 500 eV pa okrog 1,5 nm. Pri klasičnem magnetronskem



**Slika 1:** (a) Zavorna moč v odvisnosti od energije vpadnega delca. Graf prikazuje elektronsko ( $S_e$ ), jedrsko ( $S_n$ ) in celotno zavorno moč ( $S$ ) za prodiranje neonovih, argonovih in kriptonovih ionov v titan. (b) Povprečna prosta pot, ki jo ti ioni z določeno vpadno energijo lahko prepotujejo v titanu. Vrednosti so vzete iz tabel programa SRIM [16].

naprševanju so energije argonovih ionov tipično okrog 400 eV, kar pomeni, da argonovi ioni prodrejo le nekaj atomskih plasti globoko. V splošnem sicer velja, da lažji ioni prodrejo globlje v snov kot težji ioni z enako energijo, vendar pa, kot bomo pokazali kasneje, večino materialov slabše razpršujejo.

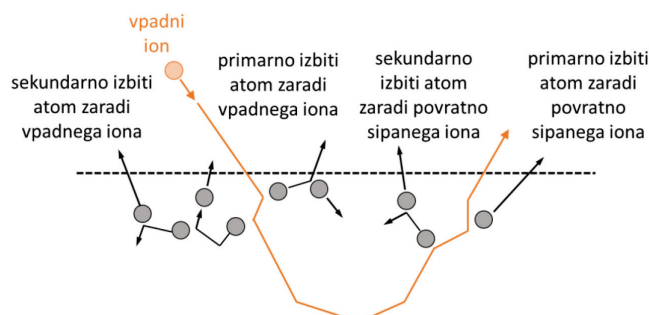
Ko ion potuje v snovi, oddaja kinetično energijo atomom v snovi. Nekateri atomi, predvsem tisti v bližini površine snovi, lahko preko prvega trka ali preko več zaporednih trkov pridobijo dovolj energije, da zapustijo snov. Ta proces bomo podrobneje opisali v naslednjem poglavju.

### 3 RAZVOJ TRKOVNIH KASKAD IN RAZPRŠEVANJE ATOMOV

Ion, ki potuje v trdni snovi, povzroči kaskadni proces. Kinetična energija iona se preko trkov prenaša med ionom in atomi v kristalni mreži – to imenujemo primarna trkovna kaskada. Kadar trk iona povzroči nadaljnje trke odbitega atoma z ostalimi atomi v kristalni mreži, govorimo o sekundarni trkovni kaskadi. Z nadaljnjimi trki odbitih atomov torej lahko nastajajo terciarni in višji redi kaskadnih trkov.

Trkovne kaskade v snovi povzročajo radiacijske poškodbe (tj. nastanek vrzeli, dislokacij in drugih nepravilnosti v kristalni strukturi), ki lahko bistveno spremenijo mikrostrukturo, sestavo in mehanske lastnosti snovi. Te spremembe niso bistvene za postopke naprševanja, so pa lahko zelo pomembne, kadar ionsko jedkanje uporabljamo v analitskih tehnikah, kot so AES, XPS ali FIB. Omeniti moramo, da intenzivnejše nihanje atomov okrog ravnovesnih leg, ki ga povzroči prodirajoči ion v snovi, predstavlja povišano notranjo energijo snovi. V tehnikah, kjer je obstreljevanje z ioni zelo intenzivno (npr. magnetronsko naprševanje), moramo obstreljevani material vedno hladiti.

**Slika 2** prikazuje več možnih procesov, ki lahko povzročijo, da atom zapusti snov. O primarno izbitem atomu govorimo, kadar vpadni ion neposredno trči z atomom, ki se nahaja na površini oz. blizu nje.

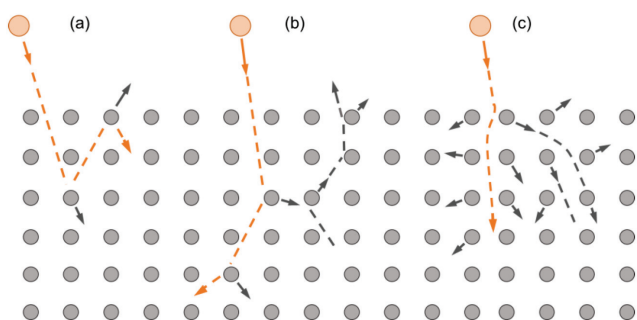


**Slika 2:** Štirje procesi, ki lahko povzročijo, da atom zapusti snov. Ločimo primarno in sekundarno izbite atome oz. izbite atome višjega reda, kadar gre za več posrednih trkov [13].

Sekundarno izbiti atomi (oz. izbiti atomi višjega reda) pa so tisti, pri katerih vpadni ion pod površino trči z enim od atomov v snovi, ta atom pa nato izbije nek drugi atom blizu površine. Podobno lahko označimo tiste razpršene atome, pri katerih se vpadni ion zaradi trkov usmeri nazaj proti površini (tj. povratno sipani ion).

Glede na energijo vpadnih ionov in sipalne preseke lahko v splošnem ločimo več trkovnih režimov, čeprav meje med njimi niso jasno definirane [17, 18]. Za lahke ione in/ali nižje energije težjih ionov se vpadni ion nekajkrat ali le enkrat odbije od atomov v snovi (slika 3a). Če se ion usmeri nazaj proti površini, lahko izbije atom iz snovi, pri čemer mora biti prenesena energija večja od površinske vezavne energije atoma (tipično nekaj eV). Temu procesu razprševanja pravimo režim neposrednega ionskega trka (angl. *single knock-on regime*). Ta režim razprševanja je pomemben, kadar so energije ionov pod 1 keV, pomembnejši pa postaja z večjimi vpadnimi koti ionov [19]. Pri magnetronskem naprševanju je ta režim pomemben, saj so energije ionov okoli 0,5 keV. Pomemben pa je tudi pri postopkih, kjer uporabljamo ionsko puško, saj snovi običajno razpršujemo pod velikimi vpadnimi koti, energije ionov pa so tipično med 1 keV in nekaj keV.

Pri višjih energijah in/ali težjih ionih je pomemben linearni kaskadni režim (slika 3b). V tem režimu imajo vpadni ioni dovolj energije, da več atomov premaknejo iz ravnovesnih leg, ti atomi pa nato trkajo z ostalimi atomi v snovi. Nastajajo torej sekundarne trkovne kaskade ter kaskade višjih redov. Za ta režim velja, da je gostota odbitih atomov dovolj majhna, da sta ob določenem času v trku udeležena le dva delca – eden, ki se giblje, in drugi, ki miruje v kristalni strukturi snovi (termična nihanja atomov v kristalni mreži lahko zanemarimo). Gre torej za neodvisno zaporedje binarnih trkov med gibajočim se delcem in mirujočim delcem. Pri tem načinu razprševanja je razpršitveni koeficient sorazmeren z energijo vpadnega iona, zato mu pravimo linearni režim. Ta režim razprševanja je značilen za energijsko področje od približno 1 keV do približno 1 MeV.



Slika 3: (a) Režim neposrednega ionskega trka, (b) linearni trkovni režim in (c) nelinearni trkovni režim. Prilagojeno iz reference [17].

Kadar snov obstreljujemo s težkimi ioni, ki imajo velik sipalni presek, ali z večjimi molekulami, je gostota odbitih atomov lahko tako velika, da se večina atomov znotraj volumna razprševanja giblje hkrati (slika 3c). Ta režim karakterizirajo nelinearni procesi, zato ga imenujemo nelinearni trkovni režim (angl. *spike regime*). Od linearnega režima se razlikuje v tem, da do binarnih trkov pride med dvema gibajočima se delcema, medtem ko pri linearnem režimu trki potekajo med enim gibajočim se delcem in drugim mirujočim. Nelinearni režim je podoben uparitvi snovi oz. natančneje sublimaciji, saj večina atomov znotraj majhnega volumna v zelo kratkem času zapusti snov.

V nadaljevanju se bomo osredotočili na opis trkov, ki potekajo v režimu neposrednega trka in v linearnem trkovnem režimu, saj sta to prevladujoča režima v tehnikah naprševanja in ionskega obstreljevanja.

Režim neposrednega trka in linearni kaskadni režim lahko opišemo kot prostorsko ločeno, neodvisno časovno zaporedje binarnih trkov, zato si bomo podrobneje ogledali fizikalno ozadje trka dveh delcev. Predpostavili bomo, da so binarni trki elastični in da atomi v snovi pred trkom mirujejo. Vpadni delec (ion ali atom) naj ima maso  $m_1$ , njegovo smer in velikost hitrosti pa naj določa vektor hitrosti  $v_1$ . Drugi delec (npr. atom v snovi) z maso  $m_2$  pred trkom miruje, kot prikazuje slika 4. Za trk velja ohranitev gibalne količine:

$$m_1 v_1 = m_1 v'_1 + m_2 v'_2 \quad (4)$$

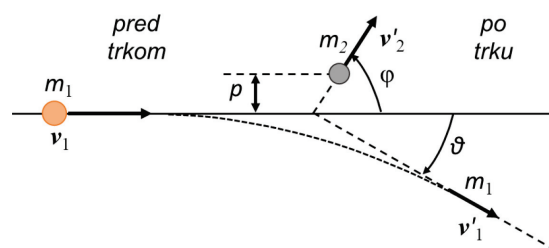
kjer sta  $v'_1$  in  $v'_2$  vektorja hitrosti delcev po trku. Pri elastičnem trku se ohranja tudi kinetična energija:

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 = \frac{1}{2} m_1 v'^2_1 + \frac{1}{2} m_2 v'^2_2 \quad (5)$$

V trku med dvema delcema je delež prenesene energije lahko največ [20]:

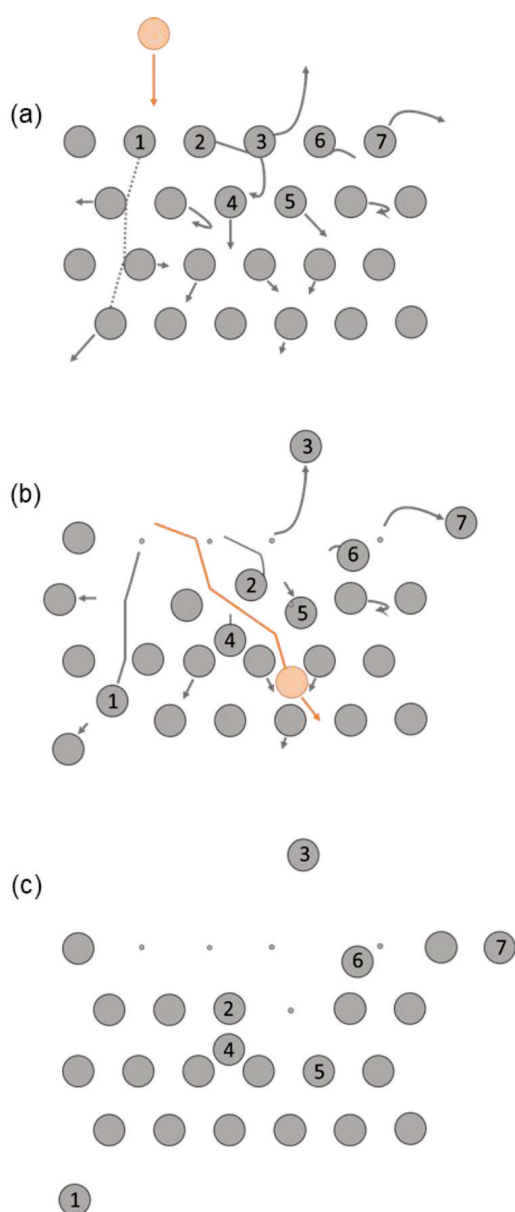
$$\Lambda = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad (6)$$

S pomočjo zgornjih enačb lahko izračunamo smer in energijo obeh delcev po trku. Ti podatki nato določajo nadaljnje gibanje vseh delcev, ki so udeleženi v trkih. To nam omogoča, da lahko prikažemo kaskadni proces, ki ga povzroči vpadni ion.



Slika 4: Binarni trk vpadnega delca z maso  $m_1$  in hitrostjo  $v_1$  z mirujočim atomom z maso  $m_2$

**Slika 5** prikazuje simulacijo kaskadnega procesa trka iona z atomi v snovi [21]. Trajektorije atomov in iona so izračunane iz enačb (4)–(6). Pri računih smo upoštevali, da je povprečna pot, ki jo delci prepotujejo v času med dvema trkoma, določena z mrežno razdaljo v kristalni strukturi. Gibalno količino atoma lahko razdelimo na smer, ki je pravokotna na površino, in smer, ki je vzporedna s površino. Pri pravokotnem vpadu ionov se večina gibalne količine prenese v smeri normale na površino in le malo v smeri, vzporedni s površino. Prvi atom, s katerim vpadni ion trči (atom št. 1), je po trku usmerjen v notranjost materiala tarče (njegovo nadaljnjo pot prikazuje črtkana trajektorija na **sliki 5**). Ion nato trči z atomom št. 2 in nanj prenese le manjši del kinetične energije.



**Slika 5:** Razvoj trkovne kaskade. Slike prikazujejo stanje ob (a)  $t = 0$  s, (b)  $t \approx 10^{-13}$  s in (c)  $t \approx 10^{-10}$  s v novem ravnovesnem stanju [21].

Na **sliki 5b** je prikazano stanje kristalne strukture  $10^{-13}$  s po vpadu iona na tarčo. Blizu trajektorije iona lahko opazimo, da se večina atomov premakne s svojih mest v kristalni strukturi. Atom št. 3 zapusti snov zaradi prenosa kinetične energije atoma št. 2, ki je večja od površinske vezavne energije atoma, medtem ko se atom št. 2 premakne globlje v snov.

Energijo, ki je potrebna, da lahko atom zapusti snov, določa površinska vezavna energija atoma v snovi  $E_{sb}$ . Ta je približno enaka sublimacijski entalpiji na delec in je odvisna od vrste atomov, njihovih medatomskih vezi, kristalne strukture in drugih parametrov [18]. Površinske vezavne energije, ki so jih eksperimentalno določili za nekaj izbranih elementov, so zbrane v **tabeli 1**. Za večino kovin je površinska vezavna energija v območju 4–8 eV, izstopata le cink in kadmij, ki imata površinsko vezavno energijo okrog 1 eV.

**Tabela 1:** Površinska vezavna energija  $E_{sb}$  za izbrane elemente [18]. Vrednosti za večino elementov periodnega sistema najdemo v programu SRIM [16].

element	$E_{sb}$ (eV)
C	7,41
Al	3,36
Si	4,70
Ti	4,89
Cr	4,12
Zn	1,35
Mo	6,83
Ag	2,97
Cd	1,16
W	8,68
Au	3,80

**Slika 5c** prikazuje stanje kristalne strukture  $10^{-10}$  s po vpadu iona. Atomi v tem času zasedejo ravnovesna stanja. Atom št. 3 je zapustil snov, atom št. 7 pa je ostal v snovi, saj ni prejel dovolj energije, da bi premagal površinsko vezavno energijo (**tabela 1**). Atom št. 4 je postal intersticijski, atom št. 5 pa je po trkovni kaskadi za seboj pustil prosto mesto (vrzel). Vpadni ion je po trkovni kaskadi postal intersticijski atom globlje v snovi in ni prikazan na **sliki 5c**.

Trk vpadnega iona s prvim atomom v snovi lahko na atom prenese veliko energije. Ta energija se nato porazdeli med atome, ki so kasneje udeleženi v trkih. Med atomi v kristalni strukturi se ob vsakem nadaljnjem trku prenese mnogo manj energije: med nekaj 10 eV ali 100 eV. Zaradi kaskadnega procesa se na atom, ki izstopi iz snovi, lahko prenese le majhen delež energije vpadnega iona. Razpršeni atom poleg predhodnih energijskih izgub med trki doživi še padec energije ob izstopu iz snovi zaradi površinske vezavne energije ter zaradi neelastičnih procesov. Razpršeni atomi imajo zato relativno nizke energije v primerjavi

z energijo vpadnih ionov. V naslednjem poglavju bomo podrobneje predstavili porazdelitev energije razpršenih atomov. Pri postopkih naprševanja energija razpršenih atomov namreč pomembno vpliva na rast in mikrostrukturo tankih plasti.

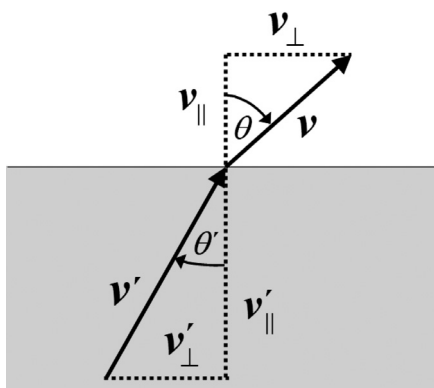
#### 4 ENERGIJA RAZPRŠENIH ATOMOV

Atomi, ki zapustijo snov zaradi kaskadnega procesa, nimajo enake energije. Njihove energije opišemo z energijsko porazdelitvijo. Teorijo razprševanja in izračun energijske porazdelitve razpršenih atomov ob vpadu iona na snov je leta 1968 prvi predstavil M. W. Thompson [22]. Izpeljava je obsežna, zato bomo predstavili le bistvene korake izpeljave. V modelu je Thompson privzel linearni trkovni režim, torej da vsak ion povzroči serijo binarnih trkov, odbiti atomi pa generirajo nove trkovne kaskade. Kaskadni proces se konča, ko v zadnjem trku ni dovolj kinetične energije, da se atom premakne iz ravnovesne lege. To se zgodi, ko ima delec energijo manjšo od  $2E_d$ , kjer je  $E_d$  energija praga premika atoma iz ravnovesne lege. Število atomov, ki sodelujejo v trkovni kaskadi in se premaknejo iz svojih ravnovesnih mest, je v povprečju enako [23]:

$$N_d = \frac{E_i}{2E_d} \quad (7)$$

kjer je  $E_i$  energija delca (iona ali odbitega atoma), ki povzroči nastanek kaskadne veje.

Če kaskadna veja doseže površino tarče, lahko atom na površini zapusti snov. Do tega pride, če atom prejme energijo, ki je večja od površinske vezavne energije  $E_{sb}$  (tabela 1). Thompson je upošteval, da atom zapusti snov, če je njegova komponenta gibalne količine v smeri normale površine večja od  $\sqrt{2E_{sb}M}$ , kjer je  $M$  masa razpršenega atoma. Smer razpršenih atomov se pri prehodu skozi površino zaradi vpliva površinske vezavne energije odkloni proč od vpadne pravokotnice (slika 6). Pojav je podoben prehodu



Slika 6: Atomu, ki zapusti površino, se zaradi površinske vezavne energije  $E_{sb}$  spremeni smer gibanja.

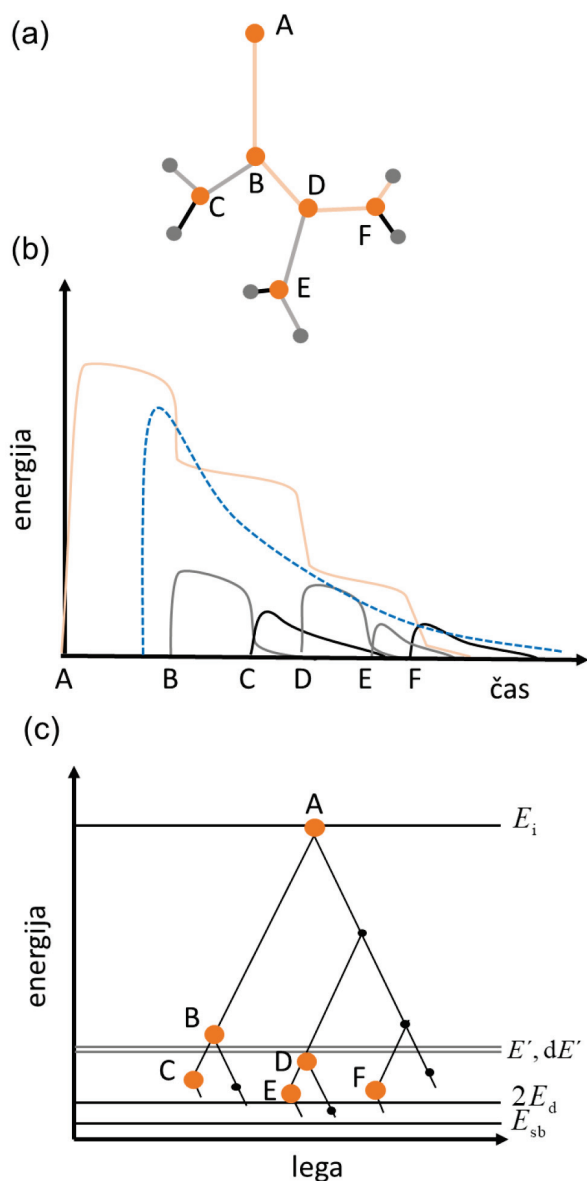
svetlobe iz optično gostejše v optično redkejšo snov. Za atom, ki zapusti površino snovi, mora veljati [17]:

$$E \cos^2 \theta = E' \cos^2 \theta' - E_{sb} \quad (8)$$

$$E \sin^2 \theta = E' \sin^2 \theta' \quad (9)$$

kjer je  $E'$  energija atomov v snovi,  $\theta'$  kot glede na normalo površine v snovi,  $E$  je energija atomov izven snovi in  $\theta$  kot glede na vpadno pravokotnico zunaj snovi.

Slika 7a prikazuje zaporedje trkov med atomi, ki so označeni z zaporednimi črkami A–F. Z oranžno barvo je označena trajektorija gibanja vpadnega iona oziroma prvega opazovanega atoma v snovi, ki ima energijo  $E_i$ . S sivo barvo so označene trajektorije



Slika 7: Shema trkovne kaskade binarnih trkov (a). S črkami A–F so označena mesta trkov. Na grafu (b) je prikazana kinetična energija vsakega izmed delcev v odvisnosti od časa in povprečna energija množice atomov, ki so udeleženi v trkih. Graf (c) prikazuje energijski diagram [24].



gibanja atomov, ki so ob trku z vpadnim ionom dobili dovolj energije, da so se premaknili iz ravnovesnih leg in trčili z drugimi atomi (sekundarne trajektorije). Trajektorije po trku tretjega reda so označene s črno barvo. Shematično spreminjanje kinetične energije delcev v odvisnosti od časa prikazuje **slika 7b**, na kateri je z modro črtkano črto prikazana povprečna energija odbitih atomov, ki sodelujejo v trkih. **Slika 7c** prikazuje energijski diagram trkovne kaskade, navpična os predstavlja kinetično energijo atomov, njihovo lego pa vodoravna os.

Zaradi množice trkov med delci lahko njihove energije in število v določenem energijskem intervalu obravnavamo statistično. Če sledimo Thompsonovi izpeljavi [24], je v povprečju hitrost oz. stopnja, s katero delci zaradi trkov prihajajo v energijski interval med  $E'$  in  $E'+dE'$ , sorazmerna  $1/E'$ . Delci v energijskem intervalu  $dE'$  potujejo čas  $dt$ , pri čemer je gostota atomov v vsakem trenutku sorazmerna  $dt/E'$ . Čas upočasnjevanja ( $dt$ ) lahko povežemo z zavorno močjo iz enačbe (1). Izguba energije delca na enoto časa je sorazmerna zavorni moči:

$$\frac{dE'}{dt} = v \frac{dE'}{dx} \quad (10)$$

kjer za hitrost delca velja  $v = dx/dt$ . Iz enačbe (10) sledi, da je čas upočasnjevanja enak:

$$dt = \frac{dE'}{v(dE'/dx)} \quad (11)$$

V energijskem področju, ki je tipično za tehnike naprševanja (tj. 100–1000 eV), je zavorna moč (tj. izguba energije na enoto prepotovane poti) približno sorazmerna energiji  $E'$  (poglavje 2 in **slika 1**). Torej lahko zapišemo:

$$\frac{dE'}{dx} = K \frac{E'}{\lambda} \quad (12)$$

kjer smo upoštevali, da delec v povprečju prepotuje dolžino  $\lambda$ , ki je enaka povprečni razdalji med atomi v snovi,  $K$  pa je konstanta. Če združimo enačbi (11) in (12), dobimo:

$$dt = \frac{(\lambda/K)dE'}{vE'} \quad (13)$$

Fluks delcev ( $j$ ) skozi dano površino znotraj snovi izračunamo s produktom hitrosti delcev ( $v$ ) in številске gostote atomov, ki je sorazmerna z  $dt/E'$ . Če torej izračunamo produkt  $v \cdot dt/E'$  ter upoštevamo enačbo (13), lahko zapišemo fluks delcev:

$$\phi(E')dE' = \frac{(\lambda/K)dE'}{E'^2} \quad (14)$$

Enačba (14) predstavlja tok delcev, ki se širi znotraj snovi, zanima pa nas, koliko delcev izstopi iz trdne snovi. Atomi, ki zapustijo površino, morajo premagati tudi površinsko vezavno energijo. Na **sliki 8** je površinska vezavna energija prikazana kot sila, ki na atome deluje v smeri, pravokotni na površino. Delovanje te sile povzroči odklon trajektorij stran od vpadne pravokotnice (v smeri proti površini tarče, kot to določata enačbi (8) in (9)). Poleg odklona trajektorij delcev se prostorski kot znotraj snovi  $d\Omega'$  ob prehodu skozi površino spremeni v večji prostorski kot  $d\Omega$ . Pokažemo lahko, da je fluks razpršenih delcev enak [24]:

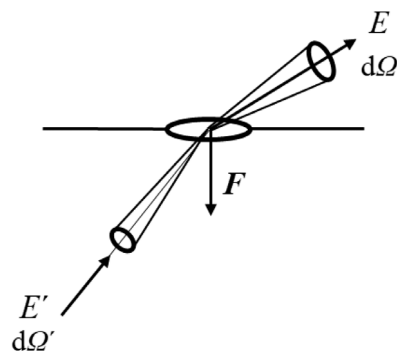
$$\phi(E')dEd\Omega = \frac{L\lambda E dE d\Omega}{(E + E_{sb})^3} \quad (15)$$

kjer je  $L$  konstanta, ki vsebuje sipalni presek za trk iona in atoma ter gostoto atomov snovi. V limiti, ko je energija razpršenega atoma mnogo večja od površinske vezavne energije (tj.  $E \gg E_{sb}$ ), iz enačbe (15) dobimo enačbo (14). Zgornje enačbe prikazujejo le del Thompsonove izpeljave. Bralcu, ki ga zanimajo podrobnosti izpeljave, priporočamo, da sledijo opisu v referencah [22, 24].

Teorijo trkovnih kaskad, kot je bila predstavljena zgoraj, ter energijsko porazdelitev razpršenih atomov je neodvisno in skoraj istočasno, čeprav na drug način, predstavil tudi Peter Sigmund [25]. Porazdelitev energije razpršenih atomov tako imenujemo Sigmund-Thompsonova (S-T) porazdelitev  $f_s(E)$  in jo v končni obliki zapišemo kot [26]:

$$f_s(E) = \begin{cases} A \frac{E(1 - \sqrt{(E_{sb} + E)/\Lambda E_i})}{(E_{sb} + E)^3} & E \leq \Lambda E_i \\ 0 & E > \Lambda E_i \end{cases} \quad (16)$$

V zgornji porazdelitvi je  $E$  energija razpršenih atomov,  $A$  normalizacijska konstanta in  $\Lambda$  koeficient prenosa energije iz enačbe (6). Energijska porazdelitev



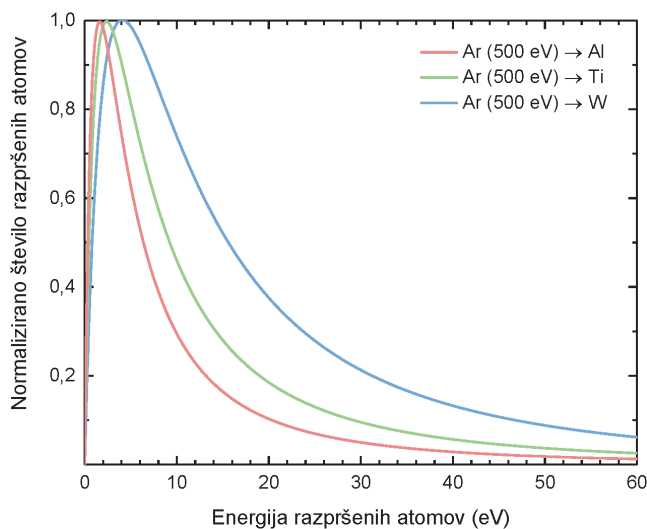
**Slika 8:** Odklon trajektorij in povečanje prostorskega kota pri prehodu skozi površino. Ob prehodu atomov skozi površino si lahko predstavljamo, da v smeri, pravokotni na površino, deluje sila  $F$ , ki je posledica vezavne energije površine.



atomov, ki zapustijo trdno snov, je torej odvisna od več parametrov. V nadaljevanju si bomo pogledali, kako na porazdelitev vplivajo vrsta razprševanega materiala ter energija in masa vpadnega iona.

#### 4.1 Energijska porazdelitev v odvisnosti od vrste razprševanega materiala

Na **sliki 9** je prikazana energijska porazdelitev razpršenih atomov, izračunana iz Sigmund-Thompsonove enačbe (16). Izračune smo naredili za tri različne materiale: aluminij, titan in volfram, pri čemer smo privzeli, da argonovi ioni z energijo 500 eV padajo pravokotno na površino. Sigmund-Thompsonova porazdelitev pada s kvadratom energije in ima maksimum v bližini  $E_{sb}/2$ . Maksimum energijske porazdelitve je odvisen predvsem od vrste tarče (tj. od površinske vezavne energije), ne pa toliko od energije ali vrste vpadnega iona. Večina atomov ima torej energijo blizu  $E_{sb}/2$ . V primeru razprševanja aluminijeve tarče ima 12,6-odstotni delež razpršenih atomov energijo manjšo od  $E_{sb}/2$  (tj. 1,68 eV), ostali delež atomov (87,4 %) pa ima višje energije. Polovica razpršenih atomov ima energije višje od 6,8 eV in le 10 % atomov ima energije, ki so višje od 37,2 eV. Ti deleži so odvisni od vrste materiala, ki ga razpršujemo. V **tabeli 2** so zbrane vrednosti za energijsko mejo, ki zajema delež 50 % in delež 10 % visokoenergijskih atomov za razprševanje aluminija, titana in volframa. V tabeli je prikazan tudi maksimum Sigmund-Thompsonove porazdelitve ter  $E_{sb}/2$ , ki je blizu maksimuma porazdelitve. Podatka se približno ujemata za vse navedene primere. Največje odstopanje je v primeru razprševanja volframove tarče. **Tabela**



**Slika 9:** Normalizirane Sigmund-Thompsonove porazdelitve energij atomov, razpršenih z argonovimi ioni energije 500 eV. Porazdelitve smo izračunali za razprševanje aluminija, titana in volframa.

podaja tudi podatek o najvišji možni energiji  $E_{max}$ , ki jo lahko dosežejo razpršeni atomi.

**Tabela 2:** Primerjava maksimuma Sigmund-Thompsonove porazdelitve in polovice površinske vezavne energije ( $E_{sb}/2$ ) za aluminij, titan in volfram. Predstavljena je tudi najvišja možna energija razpršenih atomov ( $E_{max}$ ), skupaj z energijsko mejo, ki zajema delež 50 % ali 10 % visokoenergijskih atomov. Izračuni so narejeni za vpadne ione argona z energijo 500 eV.

razprševani material	maksimum S-T porazdelitve [eV]	$E_{sb}/2$ [eV]	$E_{max}$ [eV]	energijska meja, od katere ima X % razpršenih atomov višjo energijo [eV]	
				X = 50	X = 10
Al	1,63	1,68	478	6,8	37,2
Ti	2,36	2,45	491	9,5	49,7
W	4,07	4,34	285	14,4	60,8

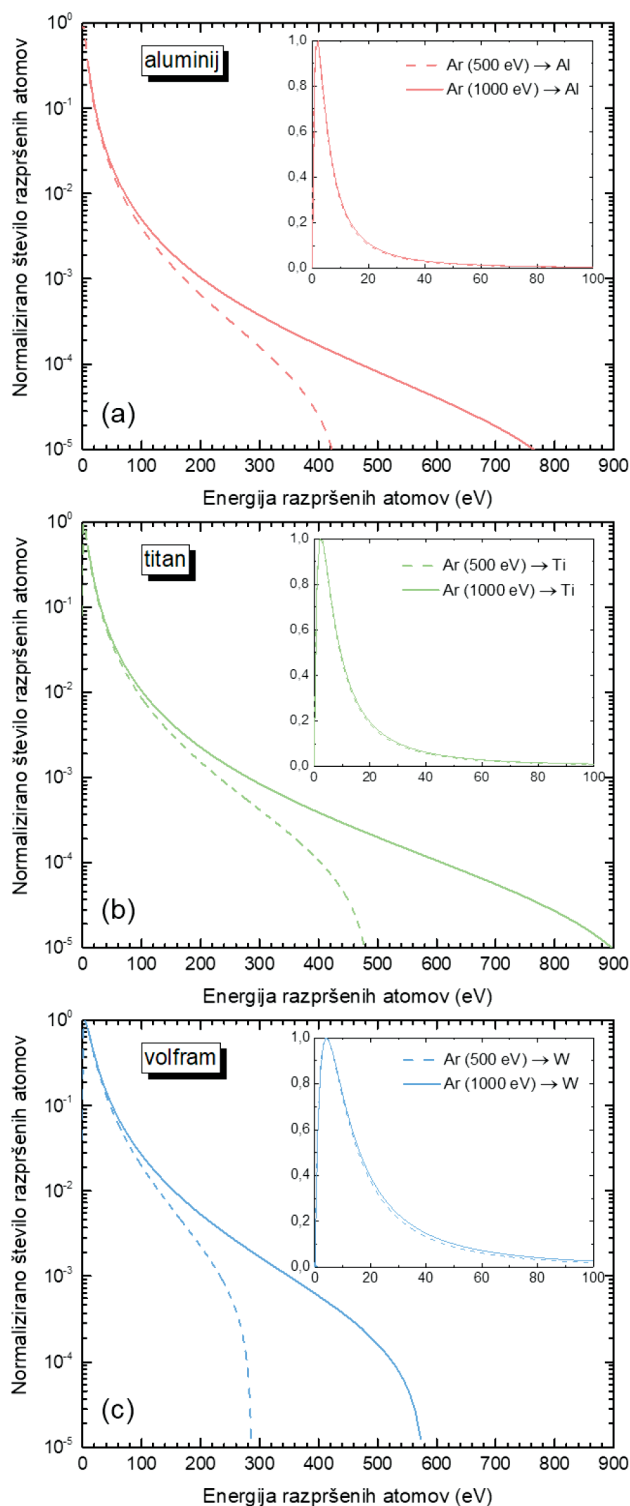
#### 4.2 Energijska porazdelitev v odvisnosti od energije vpadnih ionov

Oblika Sigmund-Thompsonove energijske porazdelitve razpršenih atomov se ne spremeni bistveno, če spremenimo energijo vpadnega iona. Maksimum porazdelitve je odvisen predvsem od vrste materiala tarče in se nahaja blizu energije  $E_{sb}/2$ , ne glede na to, kolikšna je energija vpadnega iona. Naraščanje funkcije od 0 eV do maksimuma porazdelitve se prav tako ne spremeni bistveno. Energijska porazdelitev se ob spremembi energije vpadnega iona spremeni le za atome z energijo, ki je višja od maksimuma porazdelitve, kot je razvidno iz **slike 10**. Ta prikazuje energijske porazdelitve razpršenih atomov, izračunanih iz Sigmund-Thompsonove enačbe, za razprševanje aluminija, titana in volframa z argonovimi ioni energije 500 eV in 1000 eV. Vidimo lahko, da so razlike majhne in so očitne predvsem pri višjih energijah atomov (tj. nad 100 eV). Zaradi majhnih odstopanj pri visokih energijah so porazdelitve prikazane v logaritemski skali. Razlike v deležu atomov, ki imajo energijo več kot 100 eV, so prikazane v **tabeli 3**.

**Tabela 3:** Delež atomov, ki imajo energijo večjo od 100 eV, za razprševanje aluminija, titana in volframa z argonovimi ioni energije 500 in 1000 eV

razprševani material	delež atomov z energijo nad 100 eV	
	energija Ar <sup>+</sup>	energija Ar <sup>+</sup>
	500 eV	1000 eV
Al	2,3 %	3,4 %
Ti	3,5 %	5,0 %
W	3,8 %	7,0 %

Delež atomov z energijo več kot 100 eV se razlikuje samo za nekaj odstotkov, če primerjamo energijski porazdelitvi za razprševanje z ioni energije 500 eV in 1000 eV. Če razpršujemo aluminij, je ta



**Slika 10:** Normalizirane porazdelitve energij atomov v logaritmski skali za razprševanje z argonovimi ioni energije 500 eV in 1000 eV. Porazdelitve so izračunane za (a) aluminij, (b) titan in (c) volfram. Notranji grafi prikazujejo enake porazdelitve v linearni skali za območje energij 0–100 eV.

razlika le 1,1 %, za titan 1,5 % in za volfram 3,2 %. V linearni skali razlike v energijskih porazdelitvah praktično niso opazne (notranji grafi na **sliki 10**).

Povprečna energija razpršenih atomov se ne spremeni bistveno ob večji vpadni energiji iona. V **tabeli 4** so prikazane izračunane povprečne energije razpršenih atomov aluminija, titana in volframa za vpad argonovih ionov z energijo 500 eV in 1000 eV. Povprečna energija razpršenih aluminijevih atomov se pri povečanju energije argonovih ionov s 500 eV na 1000 eV poveča za  $\approx 21$  %, titanovih atomov za  $\approx 22$  % in volframovih atomov za  $\approx 29$  %. Te vrednosti so precej nižje, kot bi pričakovali glede na dvakrat višjo energijo vpadnih ionov.

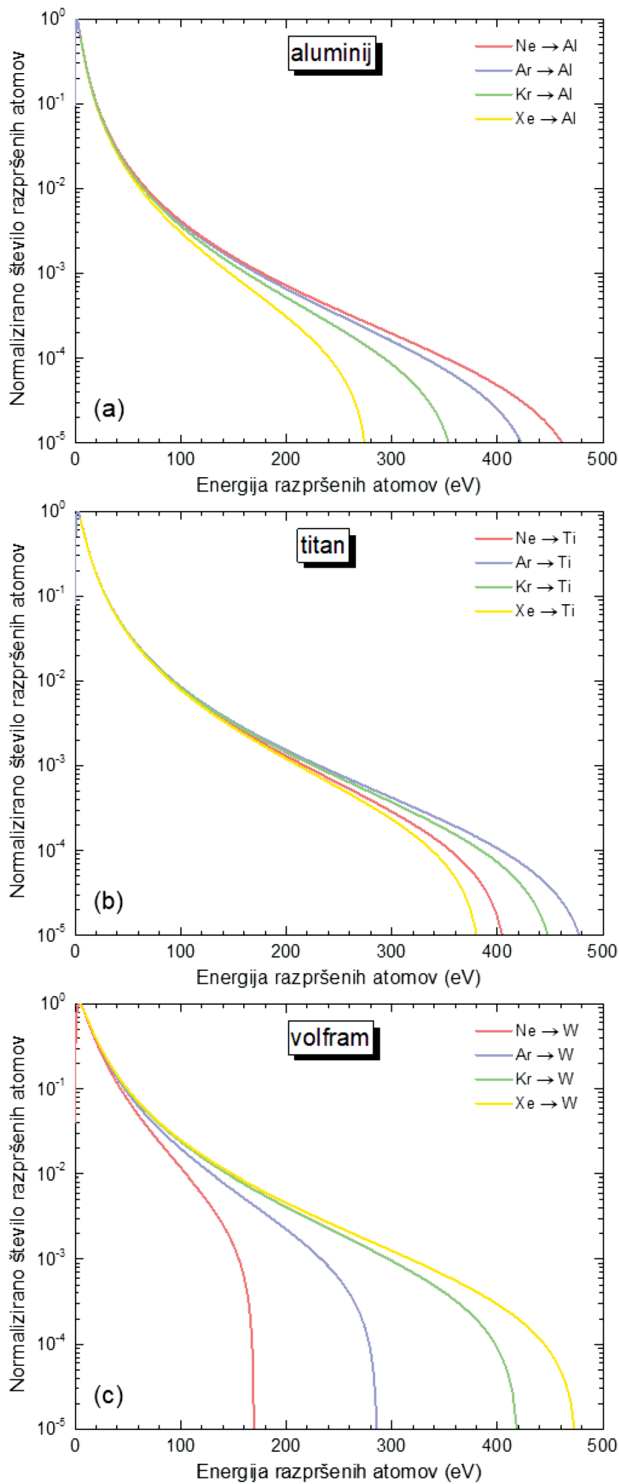
**Tabela 4:** Povprečna energija razpršenih atomov aluminija, titana in volframa za obstreljevanje z argonovimi ioni energije 500 eV in 1000 eV

razprševani material	Povprečna energija razpršenih atomov	
	energija Ar <sup>+</sup> 500 eV	energija Ar <sup>+</sup> 1000 eV
Al	16,1 eV	19,5 eV
Ti	21,2 eV	25,9 eV
W	25,4 eV	32,8 eV

#### 4.3 Energijska porazdelitev v odvisnosti od mase ionov

Energija razpršenih atomov je odvisna tudi od vrste oz. mase vpadnih ionov. **Slika 11** prikazuje energijske porazdelitve razpršenih aluminijevih, titanovih in volframovih atomov v primeru razprševanja z različnimi ioni inertnih plinov (z neonom, argonom, kriptonom in ksenonom). Vsi grafi so narisani v logaritmski skali. Porazdelitve so približno enake pri nizkih energijah razpršenih atomov, za visoke energije pa se porazdelitve razlikujejo glede na maso vpadnega iona. Največ visokoenergijskih atomov razpršijo ioni, ki imajo maso približno enako masi atomov v snovi. Takrat je tudi koeficient prenosa energije (enačba (6)) največji. Pri razprševanju aluminija dobimo največ visokoenergijskih atomov z neonovimi ioni, pri titanu z argonovimi ioni, v primeru volframa pa s ksenonovimi ioni.

V **tabeli 5** so prikazane izračunane povprečne energije razpršenih atomov aluminija, titana in volframa za vpad neonovih, argonovih, kriptonovih in ksenonovih ionov z energijo 500 eV. V splošnem velja, da so povprečne energije razpršenih atomov največje za tiste ione, katerih masa je najbližje masi atomov tarče. V primeru aluminija je povprečna energija največja pri razprševanju z neonovimi ioni (16,2 eV), pri titanu to velja za argonove ione ter pri volframu za ksenonove ione. Z večanjem razlike med maso vpadnega iona in maso razprševanega materiala se povprečna energija razpršenih atomov manjša, saj je prenos energije med različno težkimi delci manjši (enačba (6)). Razlike v povprečnih energijah se za različne ione lahko



**Slika 11:** Normalizirane energijske porazdelitve razpršenih atomov za (a) aluminij (b) titan in (c) volfram. Izračuni so bili narejeni za obstreljevanje snovi z neonovimi, argonovimi, kriptonovimi in ksenonovimi ioni energije 500 eV.

razlikujejo nekaj eV, pa tudi do 10 eV. Masa ksenona je za faktor 6,5 večja od mase neona, razlika v povprečni energiji razpršenih aluminijevih atomov pa je le 2,5 eV. V primeru titana so razlike v povprečnih energijah razpršenih titanovih atomov za različne vpadne ione najmanjše. Največja povprečna energija

razpršenih titanovih atomov je v primeru vpada argonovih ionov (21,2 eV), najmanjša pa pri vpadu ksenonovih ionov (19,6 eV). Pri razprševanju volframa so razlike v povprečnih energijah razpršenih atomov večje. Najnižja povprečna energija (20,6 eV) je pri obstreljevanju z neonovimi ioni, najvišja povprečna energija (30,7 eV) pa pri obstreljevanju s ksenonovimi ioni. Razlika je v tem primeru več kot 10 eV.

**Tabela 5:** Povprečna energija razpršenih atomov aluminija, titana in volframa za neonove, argonove, kriptonove in ksenonove ione z energijo 500 eV

	Ne	Ar	Kr	Xe
<b>Al</b>	16,2 eV	16,1 eV	14,9 eV	13,7 eV
<b>Ti</b>	20,0 eV	21,2 eV	20,6 eV	19,6 eV
<b>W</b>	20,6 eV	25,4 eV	29,4 eV	30,7 eV

## 5 SKLEPI

V članku smo predstavili teorijo razprševanja in fizikalne procese ter interakcije, ki potekajo med prodiranjem iona v snov. Na kratko smo opisali elastične in neelastične interakcije med ionom in atomi v snovi. Elastične interakcije med jedri delcev, ki sta udeležena v trku, lahko premaknejo atome iz ravnovesnih leg, zaradi česar v snovi nastajajo trkovne kaskade. Predstavili smo statistični model razprševanja, ki sta ga neodvisno razvila Thompson in Sigmund. Pomemben rezultat njunih modelov je Sigmund-Thompsonova funkcija, ki opisuje energijsko porazdelitev razpršenih atomov. To funkcijo smo uporabili za analizo vpliva različnih parametrov na energijsko porazdelitev razpršenih atomov. Maksimum energije razpršenih atomov je odvisen predvsem od površinske vezavne energije, povezane z vrsto razprševane snovi, ne pa toliko od energije ali mase vpadnega iona. Porazdelitev se ob spremembi energije vpadnega iona spremeni le za atome višjih energij, medtem ko se porazdelitev pri nizkih energijah in lega vrha porazdelitve le malo spremenita. Primerjava med masami vpadnih ionov pokaže, da so porazdelitve enake pri nizkih energijah razpršenih atomov, pri visokih energijah pa se razlikujejo glede na razmerje med maso iona ter maso atomov razprševane snovi. Največ atomov z visokimi energijami razpršijo tisti ioni, ki imajo maso približno enako masi atomov tarče, saj je takrat koeficient prenosa energije največji. V drugem delu članka (Obstreljevanje trdnih snovi z ioni: II. Simulacije razprševanja atomov) bomo razprševanje obravnavali s simulacijami, ki nam dajo podrobnejše in natančnejše informacije kot statistični opisi razprševanja.

## 6 LITERATURA

- [1] C. Steinbruchel, Ion-surface interactions: from sputtering to reactive ion etching, *Materials science and technology*, **8** (1992) 565-573.
- [2] B. Schmidt, K. Wetzig, Ion beams in materials processing and analysis, Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] P. Panjan, B. Navinšek, Ionski izviri, *Vakuumist*, **13** (1) (1993) 14.
- [4] D. J. O'Connor, B. A. Sexton, R. S. Smart, Surface analysis methods in materials science, Springer Science & Business Media, 2013.
- [5] J.C. Vickerman, D. Briggs, Tof-SIMS: materials analysis by mass spectrometry, Surface Spectra, 2013.
- [6] L.A. Giannuzzi, Introduction to focused ion beams: instrumentation, theory, techniques and practice, Springer Science & Business Media, 2004.
- [7] F. Zupanič, Tehnologija fokusiranega ionskega curka (FIB), *Vakuumist*, **26/4** (2006) 4-9.
- [8] K. Nojiri, Dry etching technology for semiconductors, Springer, 2015.
- [9] M. A. Nastasi, J. W. Mayer, Ion implantation and synthesis of materials, Springer, 2006.
- [10] W. D. Westwood, Sputter deposition, AVS, 2003.
- [11] D. Depla, Magnetrons, Reactive Gases and Sputtering, Lulu Enterprises Incorporated, 2017.
- [12] H. Winter, J. Burgdörfer, Slow Heavy-Particle Induced Electron Emission from Solid Surfaces, Springer, 2007.
- [13] W. Eckstein, Computer Simulation of Ion-Solid Interactions, Springer, 1991.
- [14] P. Sigmund, Stopping of Heavy Ions: A Theoretical Approach, Springer, 2004.
- [15] R. Behrisch, W. Eckstein, Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies, Springer, 2007.
- [16] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack, SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010), *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **268** (2010) 1818-1823.
- [17] R. Behrisch, Sputtering by particle bombardment I, Springer-Verlag, 1981.
- [18] J. E. Mahan, Physical Vapor Deposition of Thin Films, Wiley, 2000.
- [19] J. Biersack, W. Eckstein, Sputtering studies with the Monte Carlo program TRIM. SP, *Appl. Phys. A*, **34** (1984) 73-94.
- [20] E. Friedland, Radiation damage in metals, *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, **26** (2001) 87-143.
- [21] P. Williams, The sputtering process and sputtered ion emission, *Surface Science*, **90** (1979) 588-634.
- [22] M. W. Thompson, II. The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering of gold, *Philosophical Magazine*, **18** (1968) 377-414.
- [23] G. H. Kinchin, R. S. Pease, The displacement of atoms in solids by radiation, *Reports on progress in physics*, **18** (1955) 1.
- [24] M. W. Thompson, The contribution of collision cascades to sputtering and radiation damage, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **362** (2003) 5-28.
- [25] P. Sigmund, Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets, *Phys. Rev.*, **184** (1969) 383-416.
- [26] U. von Toussaint, A. Mutzke, Fluence dependent changes of erosion yields and surface morphology of the iron-tungsten model system: SDTrimSP-2D simulation studies, *Nuclear Materials and Energy*, **12** (2017) 318-322.