УДК 537.534

# ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ ФОКУСИРОВАННЫМ ПУЧКОМ ИОНОВ ГАЛЛИЯ

© 2024 г. О. В. Подорожний<sup>a</sup>, \*, А. В. Румянцев $^{a}$ , Р. Л. Волков $^{a}$ , Н. И. Боргардт $^{a}$ 

<sup>а</sup>Национальный исследовательский университет "МИЭТ", Зеленоград, Москва, 124498 Россия \*e-mail: lemi@miee.ru

Поступила в редакцию 19.02.2024 г. После доработки 28.03.2024 г. Принято к публикации 28.03.2024 г.

Методом фокусированного ионного пучка в слое термического диоксида кремния при нормальном и наклонном воздействии ионов изготовлены тестовые структуры — прямоугольные углубления, которые исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа. Экспериментально полученные профили распределения атомов галлия по глубине образца, а также коэффициент распыления сравнивали с результатами моделирования методом Монте-Карло. Вычисления проводили с использованием стандартной непрерывной и дискретно-непрерывной моделей для поверхностной энергии связи атомов в диоксиде кремния. Для нормального падения ионного пучка на основе минимизации *R*-фактора, определяющего совпадение расчетных и экспериментальных данных, найдены оптимальные значения параметров дискретно-непрерывной модели, которые оказались близкими к величинам, используемым в непрерывной модели. Показано, что полученные параметры позволяют с приемлемой точностью моделировать распыление диоксида кремния при углах падения ионного пучка 15° и 30°. Однако при угле скользящего падения 80° возникают существенные различия между экспериментальным и расчетными профилями концентрации атомов галлия, имплантированных в диоксид кремния.

**Ключевые слова:** распыление материалов ионным пучком, фокусированный ионный пучок, просвечивающая электронная микроскопия, моделирование методом Монте-Карло, диоксид кремния.

**DOI:** 10.31857/S1028096024100082, **EDN:** SHGGCG

# **ВВЕДЕНИЕ**

В современных нанотехнологиях для прецизионного формирования микро- и наноструктур на поверхности подложек из различных материалов широко применяют подходы, основанные на распылении атомов ускоренными ионами. Одним из наиболее распространенных подходов является метод фокусированного ионного пучка, при помощи которого в образцах диоксида кремния создают различные оптические структуры [1], в том числе фазовые и зонные пластинки [2], наноразмерные дифракционные решетки [3], а также оптические пинцеты [4, 5]. В ряде случаев формирование структур связано с воздействием ионного пучка на подложку при его наклонном падении. Так, пучок ориентируют под углом

к поверхности при приготовлении образцов для исследований методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [6], формировании микроструктур [7, 8], изучении самоорганизации рельефа поверхности [9]. Наклонное падение ионного пучка на распыляемую поверхность также происходит при формировании структур с высоким отношением размеров [10].

Для эффективного применения метода фокусированного ионного пучка необходимо оптимизировать процессы распыления атомов образца и имплантации ионов пучка в подложку. Для такой оптимизации исследовали взаимодействие ускоренных ионов с облучаемым веществом экспериментальными методами и с использованием компьютерного моделирования, например, ме-

тодами Монте-Карло [11] и функций уровня [12]. Моделирование методом Монте-Карло наиболее часто проводили для изучения распыления  $SiO_2$  ионами аргона. Например, в [13] рассматривали зависимости коэффициента распыления от энергии падающих ионов при нормальном воздействии, а в [14] — во всем диапазоне углов падения ионного пучка. Вместе с тем закономерности имплантации падающих частиц при вариации угла падения изучены в меньшей степени, как в случае ионов галлия, так и аргона.

Для моделирования методом Монте-Карло необходимо определение поверхностной энергии связи атомов облучаемой ионами подложки. Подробно распыление SiO, ионами аргона изучали с использованием ряда реализованных в программном пакете SDTrimSP моделей расчета поверхностной энергии связи [15]. При моделировании предполагали, что энергия связи между атомами кремния равна соответствующей энергии сублимации, и рассматривали различные значения энергии связи атомов кислорода между собой и атомов кремния и кислорода. Было установлено, что физически наиболее обоснованный способ выбора энергии связи между атомами кремния и кислорода приводит к значению 13.3 эВ, при котором возникают большие различия между экспериментальным и расчетным коэффициентами распыления. Для энергии связи атомов кислорода была предложена величина 2.58 эВ, равная половине энергии диссоциации молекулы О2, однако лучшего совпадения с экспериментальными данными в рассмотренных моделях достигали при использовании 1 эВ. Небольшое эффективное значение энергии связи между атомами, необходимое для воспроизведения экспериментальных данных, может быть объяснено образованием молекул SiO в ходе ионного воздействия и их последующей десорбцией с поверхности [16, 17]. В [14] моделирование проводили в статическом режиме и энергию связи атомов кремния и кислорода задавали равной 3.2 и 3.3 эВ соответственно. При использовании предложенной в [18] модели для расчета энергии связи атомов кислорода на поверхности кремния выбирали значение 6.79 эВ.

В настоящей работе оптимальные значения поверхностной энергии связи галлия, кремния и кислорода определяли путем количественного сравнения результатов моделирования, проведенных с применением ранее предложенной дискретно-непрерывной модели, с экспериментальными данными, полученными методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновского микроанализа для углублений, которые формировались при воздействии фокусированно-

го пучка ионов галлия на диоксид кремния. Установленные значения поверхностной энергии связи использовали для моделирования распыления диоксида кремния ионами галлия при различных углах падения пучка.

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕСТОВЫХ СТРУКТУР

Распыление термического диоксида кремния толщиной примерно 1.8 мкм, выращенного на кремниевой подложке, проводили фокусированным ионным пучком в электронно-ионном микроскопе FEI Helios Nanolab 650. Тестовая структура первого типа представляла собой прямоугольное углубление размером 3 × 3 мкм, сформированное при воздействии дозы ионов галлия  $D_0 = 5 \times 10^{17} \,\mathrm{cm}^{-2}$  при нормальном падении пучка, токе пучка 900 пА, шаге в двух перпендикулярных направлениях 38.5 нм и времени остановки 1 мкс. При изготовлении тестовых структур второго типа тот же шаблон был использован для облучения трех областей при углах падения пучка  $15^{\circ}$ ,  $30^{\circ}$  и  $80^{\circ}$  относительно нормали к поверхности образца. Значения между 40° и 70° не использовали, поскольку в этом интервале углов падения ионного пучка на поверхности образца образуется волнообразный рельеф [12].

Тонкие фольги поперечных сечений сформированных структур приготавливали с применением фокусированного ионного пучка методом in situ lift-out [6]. Он заключается в вырезании ионным пучком тонкой перемычки поперечного сечения микрометровых размеров из объемного образца и последующего ее переноса при помощи иглы-микроманипулятора на сетку-держатель для окончательного утонения. Вся процедура образца происходит приготовления камеры электронно-ионного микроскопа без ее открытия. Фольги исследовали в ПЭМ Titan Themis 200 при ускоряющем напряжении 200 кВ методами высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ), просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа.

На рис. 1а, б представлены ПРЭМ- и ВРЭМизображения приповерхностной области образца, облученного при нормальном падении ионного пучка. Верхний слой на его поверхности состоит из платины и аморфного углерода (Pt + a-C), осажденного для защиты поверхности образца в процессе изготовления тонкой фольги методом фокусированного ионного пучка. На обоих изображениях выделяются области, обогащенные галлием, в которых образуются

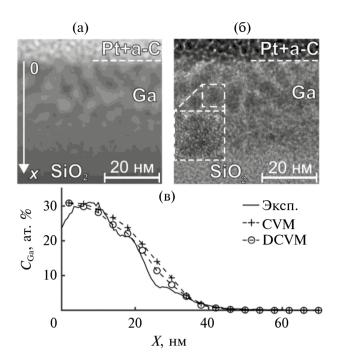


Рис. 1. ПРЭМ- (а) и ВРЭМ-изображения (б) приповерхностной области образца, облученного при нормальном падении пучка; экспериментальный и расчетные в рамках непрерывной (CVM) и дискретно-непрерывной (DCVM) моделей профили распределения концентрации имплантированного Ga по глубине образца (в).

преципитаты с аморфной структурой (рис. 16, вставка). Средний размер преципитатов составляет около 4—5 нм в приповерхностной области и постепенно уменьшается по мере увеличения глубины их залегания. Эти значения меньше размеров преципитатов Ga, формирующихся в облученном монокристаллическом кремнии и составляющих приблизительно 8 нм [19], но несколько превышают средние размеры преципитатов в SiC, примерно равные 3.5 нм [20]. Отметим, что по сравнению с кремнием в облученном SiO<sub>2</sub> не образуется обедненный атомами галлия тонкий приповерхностный слой [19]. Ниже описанных областей располагается ненарушенный ионной бомбардировкой слой SiO<sub>2</sub>.

На рис. 2а-в показаны ПРЭМ-изображения, полученные при наклонном падении ионов. Видно, что при углах падения 15° и 30° средний размер преципитатов остается примерно таким же, как при нормальном падении ионов, и несколько уменьшается до 3—4 нм при скользящем угле падения 80°. Также можно отметить, что при увеличении угла падения область, содержащая преципитаты, сжимается в направлении, перпендикулярном поверхности образца.

В исследуемых областях методом рентгеновского микроанализа были получены двумерные карты распределения атомов галлия. Для нахождения показанных на рис. 1в и рис. 2г-е профилей концентрации галлия по глубине образца  $C_{Ga}(x)$  карты усредняли в направлении, параллельном поверхности подложки. Ось х на графиках направлена вглубь образца, как показано на рис. 1а. Из рис. 2г-е видно, что при углах падения ионов пучка 15° и 30° форма профиля концентрации имплантированного галлия схожа с кривой, полученной при нормальном падении пучка, а высота профилей несколько уменьшается. Однако при угле падения ионов 80° профиль концентрации галлия имеет выраженный пик на расстоянии около 10 нм от поверхности подложки. На ПРЭМ-изображении (рис. 2в) в этой области выявляется сплошной светлый слой, возникающий благодаря преципитатам атомов галлия.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Облучение образца диоксида кремния ионным пучком галлия моделировали в программном пакете SDTrimSP 5.07 [21] в динамическом режиме с учетом имплантации атомов галлия в образец. Расчеты выполняли с использованием потенциала межатомного взаимодействия KrC, подложку толщиной 400 нм разделяли на 100 равных слоев. Углы падения пучка ионов задавали в соответствии с экспериментальными значениями, число моделируемых траекторий было равно 30000. Дозу ионов D вычисляли как  $D = D_0 \cos\theta$ . Атомную плотность образца принимали равной  $6.9 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$  в соответствии с данными для термического диоксила кремния [22].

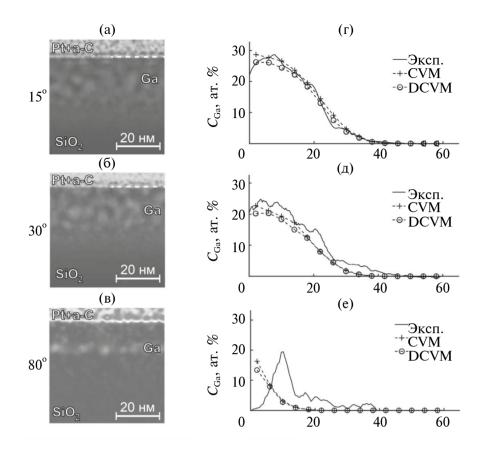
Для моделирования воздействия пучка ионов Ga на подложку  ${
m SiO}_2$  необходимо определить поверхностную энергию связи атомов галлия  $U_{{
m Ga}}$ , кремния  $U_{{
m Si}}$  и кислорода  $U_{{
m O}}$ . В наиболее общем виде в так называемой непрерывной модели (continuous variation model) эти величины вычисляют следующим образом:

$$U_{Si} = U_{Si-Si}C_{Si} + U_{Si-O}C_{O} + U_{Si-Ga}C_{Ga}, \qquad (1)$$

$$U_{\rm O} = U_{\rm O-Si}C_{\rm Si} + U_{\rm O-O}C_{\rm O} + U_{\rm O-Ga}C_{\rm Ga},$$
 (2)

$$U_{Ga} = U_{Ga-Si}C_{Si} + U_{Ga-O}C_{O} + U_{Ga-Ga}C_{Ga},$$
 (3)

где  $C_{\rm Si},\,C_{\rm O}$  и  $C_{\rm Ga}$  — концентрации атомов Si, O и Ga на поверхности образца,  $U_{\rm Si-Si},\,U_{\rm O-O}$  и  $U_{\rm Ga-Ga}$  — поверхностная энергия связи в химически чистых веществах,  $U_{\rm X-Y}$  — энергия связи атомов сорта X, окруженных атомами сорта Y.



**Рис. 2.** ПРЭМ-изображения (а—в), экспериментальные и расчетные в рамках непрерывной (CVM) и дискретно-непрерывной (DCVM) моделей профили концентрации имплантированных атомов Ga (г—е) для углов падения пучка 15°, 30°, 80° соответственно.

Для расчетов в рамках непрерывной модели диагональные элементы матрицы поверхностной энергии связи выбирали равными значениям энергии сублимации химически чистых элементов, заданным в пакете SDTrimSP 5.07 по умолчанию:  $U_{\rm Si-Si}=4.7,~U_{\rm Ga-Ga}=2.8$  эВ [23] и половине энергии диссоциации молекулы  ${\rm O_2}~U_{\rm O-O}=2.6$  эВ [15]. Недиагональные элементы матрицы вычисляли согласно часто используемому эмпирическому правилу [15] как среднее арифметическое значений энергии связи химически чистых элементов.

Поскольку в облученном образце выявляются преципитаты галлия (рис. 1а), структура связей в  $\mathrm{SiO}_2$  схожа с ранее изученными  $\mathrm{Si}$  и  $\mathrm{SiC}$  и атомы образца и ионного пучка слабо взаимодействуют друг с другом ( $U_{\mathrm{Si-Ga}} \approx U_{\mathrm{Ga-Si}} \approx U_{\mathrm{Ga-O}} \approx U_{\mathrm{O-Ga}} \approx 0$ ), аналогично [19, 20, 24] для описания процесса распыления диоксида кремния ионами галлия можно использовать дискретно-непрерывную модель (discrete-continuous variation model). Согласно [25] в подвергнутом ионному воздействию термическом  $\mathrm{SiO}_2$  основную часть связей состав-

ляют связи между атомами Si и O. Поэтому, следуя [20], для нахождения  $U_{\rm Si}$  в распыляемом SiO<sub>2</sub> вводили величину  $U_{\rm SiO_2}$ , определяющую энергию, необходимую для удаления атомов кремния из химически чистого диоксида кремния. До начала процесса распыления  $U_{\rm Si}=U_{\rm SiO_2}$ , а в ходе ионного воздействия имплантация атомов галлия приводит к уменьшению этой энергии, что можно учесть, вводя некоторую функцию  $\alpha(C_{\rm Si}, C_{\rm O})$  и представляя  $U_{\rm Si}$  в виде:

$$U_{\rm Si} = \alpha (C_{\rm Si}, C_{\rm O}) U_{\rm SiO_2}. \tag{4}$$

Полагая, что функция  $\alpha(C_{Si}, C_O)$  может также быть использована и для нахождения энергии связи атомов кислорода, имеем:

$$U_{\rm O} = \alpha (C_{\rm Si}, C_{\rm O}) U_{\rm SiO_2}. \tag{5}$$

Вследствие наблюдаемого экспериментально образования преципитатов галлия в диоксиде кремния можно считать, что распыление имплантированных атомов происходит аналогично слу-

чаю объемного химически чистого вещества, и для вычисления энергии связи  $U_{\rm Ga}$  вместо формулы (3) можно использовать соотношение

$$U_{Ga} = U_{Ga-Ga}. (6)$$

Представляя  $\alpha(C_{\rm Si},\ C_{\rm O})$  в виде ряда Тейлора в окрестности точки  $C_{\rm OSi}=1/3,\ C_{\rm OO}=2/3$  и ограничиваясь постоянным и линейными слагаемыми, получим:

$$\alpha(C_{Si}, C_{O}) = 1 - \alpha_{Si}(C_{OSi} - C_{Si}) - \alpha_{O}(C_{OO} - C_{O}), (7)$$

где 
$$lpha_{\mathrm{Si}}=rac{\partial lpha}{\partial C_{\mathrm{Si}}}\left|_{C_{0\mathrm{Si}}},lpha_{\mathrm{O}}=rac{\partial lpha}{\partial C_{\mathrm{O}}}\left|_{C_{0\mathrm{O}}}.$$
 Предполагая для

простоты, что уменьшение энергии связей  $U_{\rm Si}$  и  $U_{\rm O}$  при имплантации галлия в диоксид кремния происходит одинаково, будем считать  $\alpha_{\rm Si} = \alpha_{\rm O} = \alpha_{\rm I}$ .

Для реализации дискретно-непрерывной модели в программном пакете SDTrimSP формулы (1) и (2) для энергий связи  $U_{\rm Si}$  и  $U_{\rm O}$  представим в виде:

$$U_{\text{Si}} = U_{\text{SiO}_2} C_{\text{Si}} + U_{\text{SiO}_2} C_{\text{O}} + (1 - \alpha_1) U_{\text{SiO}_2} C_{\text{Ga}},$$
 (8)

$$U_{\rm O} = U_{\rm SiO_2} C_{\rm Si} + U_{\rm SiO_2} C_{\rm O} + (1 - \alpha_1) U_{\rm SiO_2} C_{\rm Ga}. \quad (9)$$

По сравнению с непрерывной моделью, реализующейся впредельном случае при  $\alpha_{\rm l}=1$  и при формальном выборе  $U_{\rm Si-Si}=U_{\rm O-O}=U_{\rm Si-O}=U_{\rm O-Si}=U_{\rm SiO_2},$   $U_{\rm Si-Ga}=U_{\rm O-Ga}=0,\,$  этот параметр позволяет получить более медленное убывание энергии связи  $U_{\rm Si}$  и  $U_{\rm O}$  с ростом концентрации имплантированных атомов галлия.

Для поиска оптимальных значений поверхностной энергии связей при распылении ионами галлия диоксида кремния варьировали три параметра:  $U_{\rm SiO_2}$ ,  $U_{\rm Ga-Ga}$  и  $\alpha_{\rm I}$ . Сравнение результатов расчетов для каждого набора варьируемых параметров с экспериментальными данными проводили при помощи R-фактора. В отличие от [20] профили концентрации имплантированных атомов Ga сопоставляли не только в области их пикового значения, но и по всей глубине проникновения таких атомов в подложку:

$$R = \frac{(Y - Y_E)^2}{Y_E^2} + \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} \frac{\left(C_{Ga}^{(i)} - C_{GaE}^{(i)}\right)^2}{C_{Emax}^2}, \quad (10)$$

где Y и  $Y_E$  — расчетный и экспериментальный коэффициенты распыления,  $C_{\mathrm{Ga}}^{(i)}$  и  $C_{\mathrm{Ga}E}^{(i)}$  — концен-

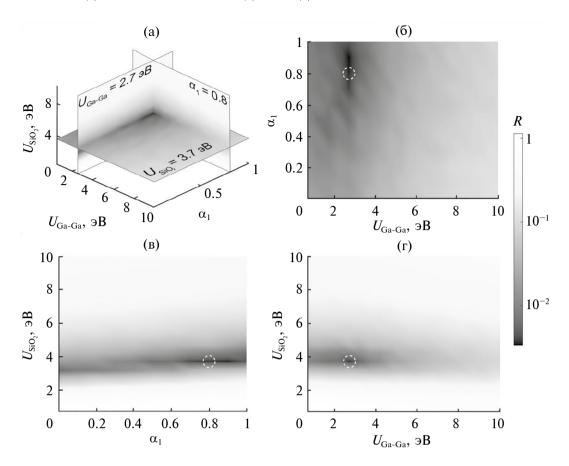
трации атомов галлия на глубине  $x_i$  в i-й точке расчетного и экспериментального профилей,  $C_{\rm Emax}$  — максимальное значение концентрации галлия в экспериментальном профиле, N — количество точек в расчетном профиле концентрации  $C_{\rm Ga}(x)$  (рис. 1в). Для использования формулы (10) проводили интерполяцию экспериментальных значений  $C_{\rm Ga}$  в точках  $x_i$  расчетного профиля.

Величины  $U_{{
m SiO}_2}$  и  $U_{{
m Ga-Ga}}$  варьировались в пределах  $0{-}10$  эВ с шагом 0.5 эВ, параметр  $\alpha_{_1}$  — в пределах от нуля до единицы с шагом 0.1. После приблизительного положения vстановления точки минимума *R*-фактора шаг вариации энергии связи был уменьшен до 0.1 эВ, и  $U_{\text{SiO}_2}$  и  $U_{\text{Ga-G}}$ изменялись в пределах от 3.5 до 4.5 и от  $\overset{3.5}{2}$  до  $\overset{3.5}{3}$   $\overset{3.5}{9}$ соответственно. Трехмерное распределение *R*-фактора для  $Y_{E} = 3.0$  представлено на рис. 3а. Видно, что минимум функции R находится при  $U_{\rm SiO_2} = 3.7,~U_{\rm Ga-Ga} = 2.7$  эВ и  $\alpha_{\rm l} = 0.8.$  Соответствующий профиль концентрации атомов Ga представлен на рис. 1в. На рис. 36-г также показаны сечения распределения, полученные для каждого из трех варьируемых параметров в области, содержащей окрестность точки минимума. Из рисунков видно, что  $\emph{R}$ -фактор главным образом зависит от  $U_{\mathrm{SiO}_2}$ , а вариации  $\alpha_{_1}$  лишь незначительно влияют на его значение.

Полученные параметры  $U_{\rm Ga-Ga}$  и  $U_{\rm SiO_2}$  близки к используемым в рамках непрерывной модели значениям энергии  $U_{\rm Si-O}=U_{\rm O-Si}=3.65$  и  $U_{\rm Ga-Ga}=2.8$  эВ. Вследствие этого результаты моделирования профилей концентрации атомов галлия, вычисленные с помощью непрерывной и дискретно-непрерывной моделей, близки к друг другу (рис. 1в).

Моделирование облучения Ga<sup>+</sup> ионами подложки SiO<sub>2</sub> при отклонении ионного пучка от нормального падения на 15°, 30° и 80° было выполнено с использованием дискретно-непрерывной модели с полученными значениями параметров, а также с помощью непрерывной модели. Вычисленные профили концентрации атомов Ga (рис. 2г, д) показывают, что оба варианта позволяют адекватно моделировать распыление диоксида кремния ионами галлия при углах наклона 15° и 30°. При угле падения ионного пучка 80° (рис. 2e) ни одна из рассмотренных моделей поверхностной энергии связи не дает возможности предсказать профиль концентрации имплантированных атомов Ga с ярко выраженным пиком на расстоянии около 10 нм от поверхности образца.

Результаты вычислений также показывают, что стационарного режима распыления поверхности



**Рис. 3.** Трехмерное распределение R-фактора в случае  $Y_E = 3.0$  (а) и его сечения в области минимума при  $U_{\rm SiO_2} = 3.7$  эВ (б),  $U_{\rm Ga-Ga} = 2.7$  эВ (в),  $\alpha_{\rm l} = 0.8$  (г). Пунктирными окружностями отмечены области минимума R-фактора.

образца достигали при дозе  $10^{17}$  см $^{-2}$  при нормальном падении ионного пучка, и доза уменьшалась до  $9 \times 10^{16}$ ,  $6 \times 10^{16}$  и  $10^{16}$  см $^{-2}$  при углах его падения, равных  $15^{\circ}$ ,  $30^{\circ}$  и  $80^{\circ}$  соответственно.

С целью систематизации данных все результаты внесены в табл. 1. Сравнение значений *R*-фактора, а также экспериментальных и расчетных профилей на рис. 1 и 2, полученных с помощью непрерывной и дискретно-непрерывной моделей, позволяет заключить, что оба варианта с приемлемой точностью дают возможность моделировать процесс распыления диоксида кремния ионами галлия. В отличие от [19], несмотря на схожие закономерности образования преципитатов в SiO, и Si при облучении ионами Ga, использование дискретно-непрерывной модели с оптимальными значениями подгоночных параметров лишь в небольшой степени улучшает совпадение результатов моделирования и экспериментальных данных по сравнению со стандартной непрерывной моделью.

Полученная в работе в результате варьирования энергия связи галлия 2.7 эВ согласуется

со стандартным значением 2.8 эВ и сильно отличается от величины 8 эВ, предложенной в [19] для адекватного описания экспериментального профиля имплантированного галлия в монокристаллическом кремнии при его распылении в стационарном режиме. По-видимому, данный результат для  $SiO_2$  можно объяснить отсутствием существенного перераспределения имплантированных атомов в ходе процессов, не учитываемого при моделировании в приближении бинарных столкновений.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для изучения распыления термического диоксида кремния ионами галлия сформированы тестовые структуры прямоугольной формы при нормальном и наклонном падении фокусированного ионного пучка. Полученные структуры изучены методами просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа, по данным которого построены профили распределения атомов галлия по глубине облученного образца. Найденные

**Таблица 1.** Сравнение экспериментальных данных (коэффициентов распыления *Y* и *R*-факторов) для различных углов падения ионного пучка с результатами моделирования, полученными с использованием двух моделей расчета поверхностной энергии связи

Угол падения пучка, град	Y, R	$U_{ m Ga-Ga} = 2.8 \  m { m 3B}, \ U_{ m Si-O} = 3.65 \  m { m 3B}$	Дискретно-непрерывная модель $U_{\rm Ga-Ga} = 2.7~{\rm эB},$ $U_{\rm SiO_2} = 3.7~{\rm эB},~\alpha_{_1} = 0.8$	Эксперимент [12]
0	Y	2.93	2.98	3.0
	R	0.008	0.003	_
15	Y	3.21	3.26	3.6
	R	0.018	0.012	_
30	Y	4.18	4.30	4.1
	R	0.004	0.009	_
80	Y	24.08	23.36	28.4
	R	0.115	0.107	_

экспериментальные профили при нормальном падении ионного пучка сравнивали с результатами моделирования методом Монте-Карло с применением дискретно-непрерывной модели расчета поверхностной энергии связи атомов. В ней энергия  $U_{\mathrm{SiO}_{2}}$ , необходимая для удаления атомов кремния и кислорода из химически чистого  $\mathrm{SiO}_{\gamma}$ , энергия связи между атомами галлия  $U_{\mathrm{Ga-Ga}}$ и величина α, учитывающая влияние образующихся преципитатов Ga на распыление диоксида кремния, являются подгоночными параметрами. Их значения, найденные путем минимизации R-фактора, оказались равными:  $U_{{
m SiO}_2} = 3.7$ ,  $U_{\text{Ga-Ga}} = 2.7$  эВ и  $\alpha_1 = 0.8$ . Полученная величина  $U_{\text{SiO}_2}$  хорошо согласуется с энергией 3.65 эВ, используемой в стандартной непрерывной модели и вычисленной как среднее арифметическое значений поверхностной энергии связи химически чистых кремния и кислорода, а энергия связи атомов галлия практически не отличается от обычно используемого значения 2.8 эВ.

Установленные параметры дискретно-непрерывной модели позволили с приемлемой точностью описать профили имплантированного в диоксид кремния галлия и вычислить коэффициенты распыления при углах падения ионного пучка 15°, 30°. При его скользящем падении под углом 80° моделирование предсказывает адекватное значение коэффициента распыления, но не позволяет получить реалистичное распределения атомов галлия по глубине образца.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 23-19-00649).

# КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Sloyan K., Melkonyan H., Dahlem M.S. // Int. J. Adv. Manuf. Technol. 2020. V. 107. P. 4469. https://doi.org./10.1007/s00170-020-05327-5
- Ribeiro R.S.R., Dahal P., Guerreiro A., Jorge P.A.S., Viegas J. // Sci. Rep. 2016. V. 7. P. 4485. https://doi.org./10.1038/s41598-017-04490-2
- 3. Nayak K.P., Kien F.L., Kawai Y., Hakuta K., Nakajima K., Miyazaki H.T., Sugimoto Y. // Opt. Express. 2011. V. 19. № 15. P. 14040. https://doi.org./10.1364/OE.19.014040
- 4. Cabrini S., Liberale C., Cojoc D., Carpentiero A., Prasciolu M., Mora S., Degiorgio V., De Angelis F., Di Fabrizio E. // Microelectron. Eng. 2006. V. 83. P. 804. https://doi.org./10.1016/j.mee.2006.01.247
- Berthelot J., Aćimović S.S., Juan M.L., Kreuzer M.P., Renger J., Quidant R. // Nat. Nanotechnol. 2014. V. 9. P. 295.
  - https://doi.org./10.1038/NNANO.2014.24
- 6. *Mayer J.*, *Giannuzzi L.A.*, *Kamino T.*, *Michael J.* // MRS Bull. 2007. V. 32. № 5. P. 400. https://doi.org./10.1557/mrs2007.63

- Han Zh., Vehkamäki M., Leskelä M., Ritala M. // Nanotechnology. 2014. V. 25. P. 115302. https://doi.org./10.1088/0957-4484/25/11/115302
- 8. Kim H. B., Hobler G., Steiger A., Lugstein A., Bertagnolli E., Platzgummer E., Loeschner H. // Int. J. Precis. Eng. Manuf. 2011. V. 12. P. 893. https://doi.org./10.1007/s12541-011-0119-3
- Alkemade P.F.A. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. P. 107602. https://doi.org./10.1103/PhysRevLett.96.107602
- 10. *Kim H.B.* // Microelectron. Engin. 2011. V. 88. № 11. P. 3365. https://doi.org./10.1016/j.mee.2011.07.008
- 11. *Mahady K.T., Tan S., Greenzweig Y., Raveh A., Rack P.D.* // Nanotechnology. 2018. V. 29. № 49. P. 495301. https://doi.org./10.1088/1361-6528/aae183
- 12. Rumyantsev A.V., Borgardt N.I., Volkov R.L., Chaplygin Y.A. // Vacuum. 2022 202. P.111128. https://doi.org./10.1016/j.vacuum.2022.111128
- 13. *Seah M.P.*, *Nunney T.S.* // J. Phys. D. 2010. V. 43. № 25. P. 253001. https://doi.org./10.1088/0022-3727/43/25/253001
- Duan G., Xing T., Li Y. // AOMATT. SPIE. 2012.
   V. 8416. P. 585.
   https://doi.org.10.1117/12.973697
- 15. Mutzke A., Schneider R., Eckstein W., Dohmen R., Schmid K., von Toissaint U., Bandelow G. SDTrimSP Version 6.00 IPP Report 2019-2, 2019. 91 p.
- 16. *Бачурин В.И.*, *Кривелевич С.А.*, *Потапов Е.В.*, *Чурилов А.Б.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. № 3. С. 19.

- 17. *Бачурин В.И., Изюмов М.О., Амиров И.И., Шуваев Н.О.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 2. С. 146.
  - https://doi.org.10.7868/S0367676518020035
- 18. *Kudriavtsev Y.*, *Villegas A.*, *Godines A.*, *Asomoza R.* // Appl. Surf. Sci. 2005. V. 239. № 3–4. P. 273. https://doi.org.10.1016/j.apsusc.2004.06.014
- 19. Румянцев А.В., Подорожний О.В., Волков Р.Л., Боргардт Н.И. // Изв. вузов. Электроника. 2023. Т. 28. № 5. С. 555. https://doi.org.10.24151/1561-5405-2023-28-5-555-568
- 20. Румянцев А.В., Подорожний О.В., Волков Р.Л., Боргардт Н.И. // Изв. вузов. Электроника. 2022. Т. 27. № 4. С. 463. https://doi.org.10.24151/1561-5405-2022-27-4-463-474
- 21. *Mutzke A.*, *Bandelow G.*, *Schmid K.* News in SDTrimSP Version 5.05, 2015. 46 p.
- 22. *El-Kareh B.*, *Hutter L.N.* Fundamentals of Semiconductor Processing Technology. New York: Springer Science & Business Media, 1995. 602 p. https://doi.org.10.1007/978-1-4615-2209-6
- 23. *Eckstein W.* Computer Simulation of Ion-Solid Interactions. Berlin—Heidelberg: Springer, 2013. 296 p. https://doi.org.10.1007/978-3-642-73513-4
- 24. *Румянцев А.В.*, *Боргардт Н.И.*, *Волков Р.Л.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 6. С. 102. https://doi.org.10.7868/S0207352818060197
- 25. *Hofmann S.*, *Thomas III J.H.* // J. Vac. Sci. Technol. B. 1983. V. 1. № 1. P. 43. https://doi.org.10.1116/1.582540

# Study of Silicon Dioxide Sputtering by a Focused Gallium Ion Beam

## O. V. Podorozhniy<sup>1, \*</sup>, A. V. Rumyantsey<sup>1</sup>, R. L. Volkoy<sup>1</sup>, N. I. Borgardt<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research University of Electronic Technology, Zelenograd, Moscow, 124498 Russia

\*e-mail: lemi@miee.ru

Test structures in the form of rectangular boxes fabricated on thermal silicon dioxide substrates under normal and oblique ion bombardment using the focused ion beam technique were studied by transmission electron microscopy and energy-dispersive X-ray microanalysis. The experimentally obtained depth distribution profiles for gallium atoms, as well as the sputtering yields, were compared with the results of Monte Carlo simulations. Calculations were carried out using standard continuous and discrete-continuous models for the surface binding energy of atoms in silicon dioxide. For the normal incidence of the ion beam, based on minimizing the value of the *R*-factor, which characterizes the agreement between the calculated and experimental data, the optimal values of the parameters of the discrete-continuous model were found, which turned out to be close to the values used in the continuous model. It is shown that the obtained parameters make it possible to simulate silicon dioxide sputtering with acceptable accuracy at ion beam incidence angles of 15° and 30°. However, at a grazing incidence angle of 80°, significant differences arise between the experimental and calculated profiles of the concentration of gallium atoms implanted in silicon dioxide.

**Keywords:** ion beam sputtering, focused ion beam, transmission electron microscopy, Monte Carlo simulation, silicon dioxide.