

教程#2——靶的混合和溅射

前一个教程介绍了如何设置 TRIM、如何确定一个 n 型井的注入离子和能量以及如何估算在注入过程中的损伤。这个教程将介绍其它离子与固体的相互作用。

界面混合和溅射

界面混合是原子从一层靶被输运到另一层靶的过程。通常这是不希望产生的效应。我们已经看到了离子如何将大量的能量转移给反冲原子并使其移动很长的距离，产生显著的级联碰撞（参阅教程四）。当一个反冲原子穿过一个靶层进入另一层时，该靶层就被污染了。

然而有一些特例是特意应用反冲混合进行材料改性，这个过程被叫做“**反冲注入**”。这个技术用于一些操作起来很难或者具有危险性的材料的注入。一个例子是包含放射性物质材料的合成。例如将很薄的一层钙沉积在硅靶上，然后将其放置在一个核反应堆中使钙转化成放射性同位素。之后硅靶被放置在离子注入机中并将大剂量的氙（Xe）注入到钙层中去。氙离子就会将一些放射性物质撞击到硅靶并使其停留于其中。在移除所有剩余在表面的钙原子后，含有放射性钙的硅靶就可以被安全地处理了。若需要提供一个能释放出放射性离子（此处来自于钙原子）而危险性又远低于纯的放射性钙靶的样品，这样的靶是很合适的。

溅射是和反冲注入相反的一个过程。表面原子通过产生的级联反冲往回冲出靶，并具有足够的能量能够离开靶并脱离靶表面。表面会施加给原子一种结合力，即所谓**表面束缚能** E_{surf} 。由于靶表面的原子并不是在一个面上被束缚住的，因而要使它从其晶格中移位所需的能量比它在固体内部被其他原子围绕时要小。一个表面原子所受到的电子约束更小。对固体而言， E_{surf} 通常小于移位能 E_{disp} 。

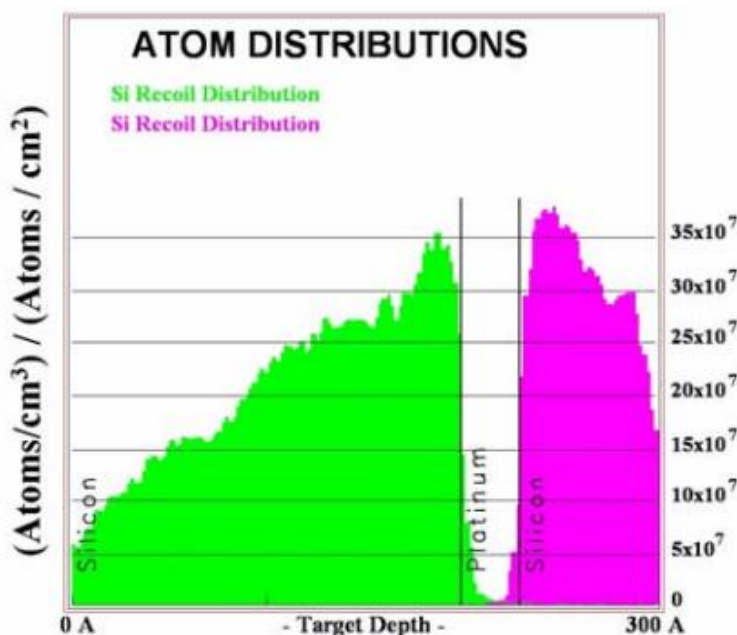
-
- 点击桌面上的图标打开 SRIM 软件。
 - 在操作界面上点击 **TRIM Calation** 键打开 TRIM 设置窗口。
 - 点击 **TRIM DEMO** 键。窗口将生成 12 个例子的输入，它们展示了在不同的应用中 TRIM 可以如何被使用。点击 **Xe into Si/Pt/Si(Mixing a Marker)** 按键：查看 TRIM 计算的各种输入参数。
然后点击 **Save Input and Run TRIM** 窗口将会关闭，而 TRIM 将会马上开始进行计算。

靶混合

该例展示了在硅靶中间的一个铂的薄层。它用来展示相互混合效应能够有多大。

点击选择图像：

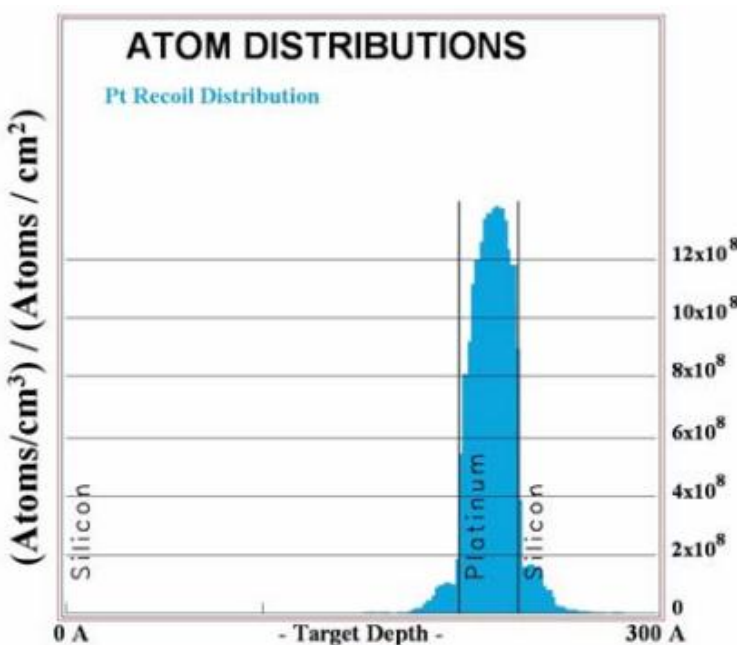
Ion/Recoil Distribution。在弹出的子菜单中选择 “**2-Silicon Recoil Distribution**” 和 “**4-Silicon Recoil Distribution**” 然后点击



Plot。这两类反冲硅原子的分布将会用两种不同颜色绘制以区分。就在不到 100 个离子入射之后，含有铂的空隙就开始被硅原子填充了。在进行到 400 个原子时，这个层将会有接近 5% 的硅原子。对于如氙（原子序数为 54）这样的重离子，原子向这个层中的转移的效率将会很高。关闭这个图像窗口。

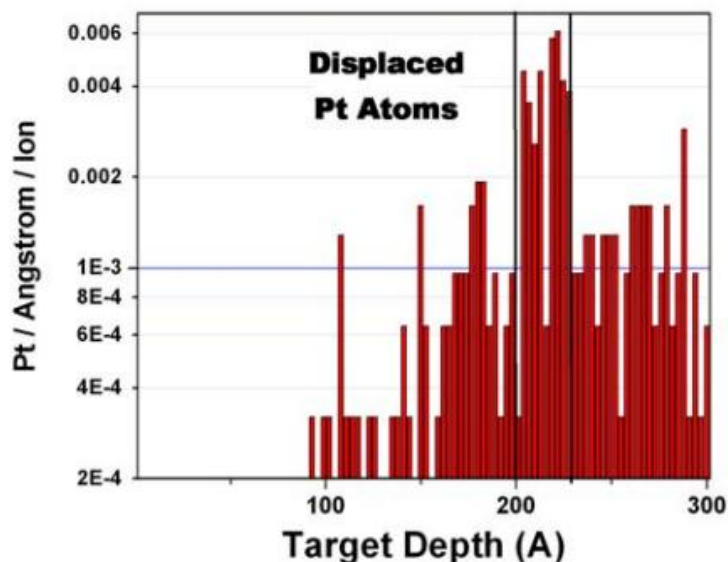
再次点击图像：

Ion/Recoil Distribution。在弹出的子菜单中选择 **3-Platinum Recoil Distribution** 然后点击 **Plot。**这个图像展示了铂层中的原子，以及其中的多少已经进入了硅中。尤其值得注意的是朝着表面移位的铂原子数非常大，比例达到 50%，和被驱使深入到靶中的铂原子数相当。这是非常值得注意的！离子都在进入深入靶中的方向，并且所有的初始反冲粒子一般也是朝着与入射粒子相同的方向，也就是深入靶中。可是最后原子为何能停留在比它们开始时更接近表面的位置呢？



为了得到其中缘由，点击 **XY Longitudinal** 图像来展示每个离子以及它造成的移位（这个图像在 **Collision Plots** 部分）。在这个图像的底部有一个标记为 **-Clear** 的按键。这将会清除图像使得你可以看到单个粒子和它产生的级联反冲。离子径迹是一条稀疏的红色点

状线，所有的级联反冲都由此开始。每个级联反冲（不是离子的级联反冲）开始都是朝着向前的方向，但是随后其方向很快变为向各个方向随机分布。稠密的级联反冲的轨迹看上去分布于没有特定取向的绿色球状空间中。级联反冲牵涉到如此多的粒子，（其中包含的信息量如此



之大）以至于任何初始离子方向的信息都迅速被丢失了。这个级联反冲变成了各向同性的事件，即原子会朝一个方向运动的概率大致相当（注意：对于高性能的电脑，可能需要按下“Clear”键后再在 TRIM 窗口的顶部按下“Pause”，然后会在下一个离子进入后停止展示）。

这就是使铂原子朝着表面移动的原因。这些大的级联反冲会迅速失去原有的前进方向方向而变得具有向各个方向运动的可能。其发生的程度大小可以用被向前散射并深入到硅靶中的铂原子数和朝表面散射的铂原子数的差分来衡量。

第二个需要注意的问题是铂原子移动的距离很长。初始的铂原子层厚度为 30 埃。使用不超过 500 个入射粒子进行模拟，你将能够看到有铂原子被推出 30 埃的铂原子层以外。

如果你去到 TRIM DISTRIBUTIONS 选项框然后点击 File 选择 Ion/Recoil Distributions 命令，你将得到一张数据表格，它比图像展示了更多的细节。这个文件被放置在 SRIM 根文件夹下的 SRIM Outputs 中，并被命名为 RANGE.txt。其数据显示，一些铂原子到达深入表面 100 埃的位置，而其他部分原子已经到达了靶的背面。反冲效率如此之高，以至于在使用不到 500 个入射粒子时已经有铂原子移位并穿过了硅靶。如果 TRIM 再使用几千个离子进行模拟，一些铂原子将会穿出靶的背面并与靶分离。

让上边的 TRIM 计算继续进行，直到超过 1000 个离子的模拟完成。由于计算的图像窗口会减慢计算的速度，你可以通过关闭它们来提高计算速度。

靶溅射

溅射是指近表面原子从靶中脱离的现象。当一个级联反冲给靶原子一个大于其表面束缚能的能量时，原子可能会被溅射。而实际上要发生溅射时，原子穿过表面时它垂直于表面方向的动能必须大于表面束缚能。表面溅射以溅射率描述，其定义为每个入射粒子所能溅射出的平均靶原子数。如果靶由若干种元素组成，每种元素都溅射率具有相应的溅射率。

$$\text{溅射率} = \text{溅射出的原子数} / \text{入射离子数}$$

目前只有几种材料的特定种类原子表面束缚能（SBE）是已知的，但通常可以使用升华热来进行估计。典型值是：镍 Ni（4.46eV）、铜 Cu（3.52eV）、钯 Pd（3.91eV）、银 Ag（2.97eV）、铂 Pt（5.86eV）和金 Au（3.80eV）。当你设置 TRIM 计算时这些值将会被提示。

关于溅射的附议：

- 对于溅射而言，只有朝向靶表面的级联反冲是重要的。因而通常只使用单个薄靶来模拟溅射就足够了。以相对原子质量超过 20 的重离子为例，通常一个厚为 300 埃的靶就足够了。使用非常薄的靶可以减少用于计算对溅射无贡献的级联反冲的时间。对于像氢这样的轻离子，由于离子可以在靶的深层产生背散射并造成表面的溅射，使用较厚（比如 1000 埃）的靶，就十分必要。一次计算所需要的靶深度可以通过运行几个快速的情形进行估算，即采用变化厚度的靶进行计算，然后看看在哪个厚度溅射率趋向于常值。
- 溅射率对表面束缚能（SBE）（而表面束缚能是需要输入的一个计算参数）非常敏感。注意，对于真实的表面，这个能量随着离子轰击会由于表面粗糙度、损伤以及化合物的表面化学计量的变化而变化。溅射率对表面束缚能的敏感度可以在计算时通过使用图像菜单来展现。溅射率对 SBE 图像可以精确到大约 30%。

【对于低能离子入射情况下靶中的级联反冲（溅射的一个主要贡献），TRIM 为计算散射，采用了以下文献中的硬球模型：J.P.Biersack and W. Eckstein, Appl. Phys., A34,73-94(1984)。文中的图 3 就是一个例子。】

一些离开靶的级联反冲原子可能是从比表面区域更深的靶内部出来。我们能够发现，一些铂原子是从超过 200 埃深的靶内部碰撞后溅射出来的。现在看着 TRIM 窗口右边名为 SPUTTERING YIELD(SY)的部分。这给出了每个入射粒子溅射出的原子数。其显示每个入射粒子会溅射出大约 6 或 7 个硅原子。事实上这些离子正在产生一个洞，因为更多的原子在离开而不是到达，其比例达 6:1！进一步说，如果计算使用超过 1000 个离子，你将会看到甚至会有一定数量的铂原子溅

SPUTTERING YIELD		
	Atoms/Ion	eV/Atom
TOTAL	6.463	
Si	6.46	74.75
Pt	0.005324	6422.23
Si	0.000000	0.00

?

☒ Save every

10000

ions

Random Number Counter

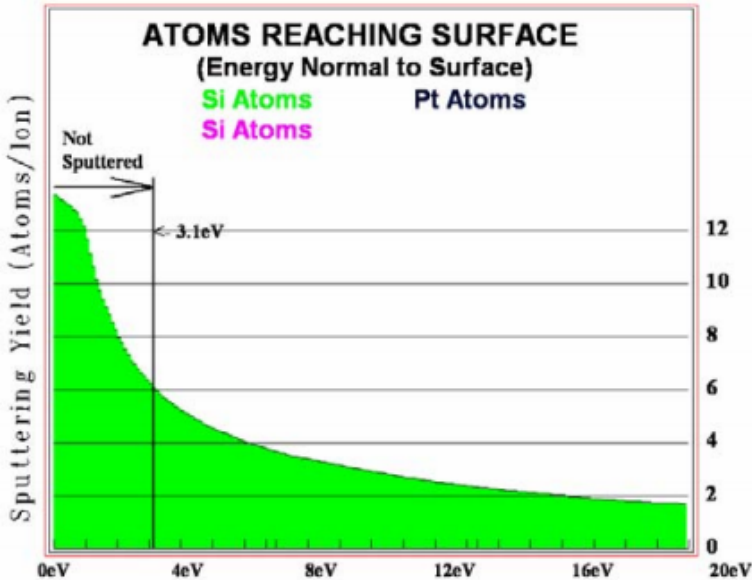
31097131

HELP

射出来。给出的铂溅射率为 0.005324（每 200 个离子约 1 个）。它们从靶内 200 埃处出发，并且某些级联反冲能量大到铂原子能够穿过顶部表面！

- 点击 TRIM 窗口最上端的键 **PAUSE** 暂停 TRIM 计算。
- 在左边“DISTRIBUTIONS”的下面，点击: **Integral** 和 **Differential Sputtered Atoms**

首先观察名为 **Sputtering (Integral)** 的图像。这个图名显示在图像窗口的顶端。这个图像给出了每个到达靶表面的反冲原子能量。坐标轴单位为原子/离子 (**Atoms/Ion**)，即每个离子将会产生对应坐标数量的能到达表面的反冲原子。图中有一条标记为 **3.1eV** 的垂线，它是表面束缚能 **E_{surf}** 的平均值，在这个算例中为

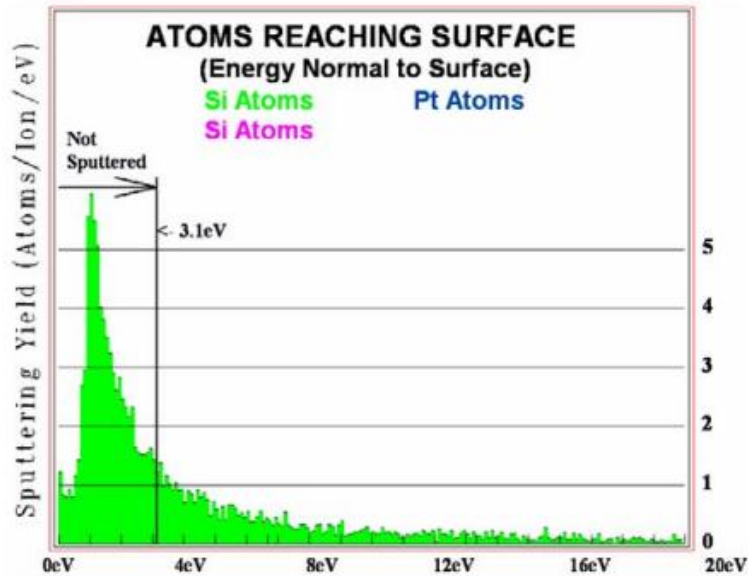


硅原子的。这条线的左边对应说明文字为 Not Sputtered（未溅射）的箭头。在 3.1eV 处，到达表面时拥有超过这个能量的原子数约为 7。这是被溅射出来的原子数，并且它和我们在上面的 SPUTTERING YIELD 表中看到的数字是吻合的。

下面我们来讨论一下表面束缚能。这是一个原子要被溅射出来所需要的最小能量。应该清楚的是只有离子能量的垂直分量可以被计入。也就是说一个以入射角 45° 到达表面的离

子需要具有 1.4 倍的 E_{surf} 才能被溅射。在下面你将绘制的图中，这个修正被自动加入了。显示的原子能量总是原子能量的垂直分量，而非其总能量。

表面束缚能的值可能随着辐照而变化。这是因为溅射使得靶变得粗糙和有损伤，而较为粗糙的靶会有较小的表面束缚能。当靶变粗糙时，由于每个表面原子电子束缚减弱，溅射率会上升。因此溅射的计算不包括所有的效应——尤其是当束流使表面粗糙化时，表面束缚能会随着时间

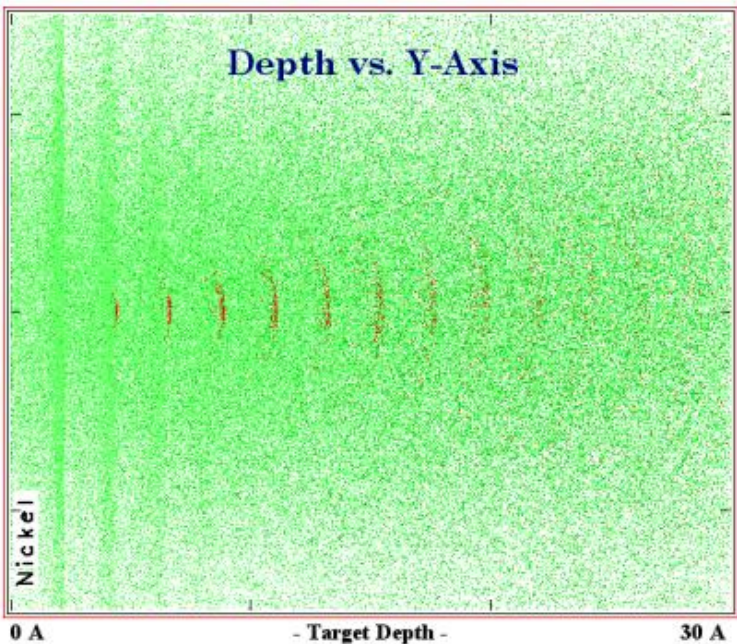


的变化。但是这个图像已经能够让我们估计随着时间的变化，溅射率会有怎样的变化。我们可以看到如果表面束缚能被减小一半，溅射的增加倍数小于 2。即使表面束缚能被减少到零，溅射率只会增加两倍。因此无论靶表面发生了什么，计算结果都会精确在两倍之内。

在图像上点击 **SPUTTERING (Differential)** 将其置顶。这是之前积分图像对应的微分图像。积分图像展示了到达表面的且能量不低于为给定能量的原子个数。而这个图像展示了到达表面的原子能量的分布。典型的能量非常低，大约为 1 到 2eV。

停止 TRIM 计算。你可以通过点击窗口右上角的关闭键或者点击 File 键然后选择 Exit 来停止。当被问到是否想要保存计算结果时，选择 NO。TRIM 计算窗口将会关闭，然后你将返回到 TRIM 设置窗口。

- 点击 **TRIM DEMO**
- 然后选择 **Sputtering: Xe into Nickel** 可以尝试一个不同的计算。这个计算将会



给出一个溅射的极端例子。

随着计算的进行，在一开的 **XZ Longitudinal** 图像中，你将会看到红色小点所代表的离子产生的错位开始在垂直线上集成簇状。在镍中，原子之间的空隙只略大于 2 埃，而这正好是月牙状红色点群中点间的距离。入射离子在靶的每个单层中只能进行一次碰撞，因而当你观察这个图像时（靶的总深度小于 15 个原子）你可以看到实际的原子结构。在一段时间之后，绿色的点将会开始呈现出相同的条纹状。这同样是由靶中原子间距确定的。

点击 **DISTRIBUTIONS** 图像中的 **Integral Sputtering**。这个图像表明每个入射离子能溅射出超过 10 个的原子。但是原子能量积分的斜率相比之前的硅靶要陡得多。如果表面变得粗糙化了，靶的表面束缚能降低，那么溅射率可能上升为原来的两倍甚至三倍。由于在这个算例中，我们无法知道表面的粗糙程度，溅射计算只能视为粗略的估计。表面的粗糙的取决于如多晶镍的晶粒大小等等因素。这些效应无法包含到 **TRIM** 计算中。

所有溅射原子的详细信息可以通过点击 **File** 按钮来保存。这会生成一个名为“**SRIM Outputs\SPUTTER.txt**”的文件。这个文件的一个典型例子如下（注意到这个文件必须使用 **MS-LineDraw** 字体来生成才能得到报告中的各种线条和方框）。

总结：混合和溅射的计算

- 界面混合时原子可以从初始位置移动超过 100\AA 的距离，因而可以是一个很显著的效应
 - 会有数量相当可观的原子向表面移动。它们也能移动很远的距离。
 - 每个入射离子若能使超过 5 个原子移位，溅射可以很迅速地侵蚀表面。
 - 一些原子会从靶的深处溅射出来，正如我们看到的铂原子从表面下超过 200\AA 处溅射出来。
-

Example of datafile SPUTTER.txt

SPUTTERING CALCULATION								
=====								
= AXIS DEFINITIONS: X=Depth, Y,Z= Lateral plane of target surface.=								
= Shown are: Ion Number								
= Sputtered atom type (atomic name) and energy (eV)								
= (Note: SBE is NOT subtracted from atom energy)								
= Point of ejection relative to ion entrance point.								
= Trajectoryal cosines of ejected atom.								
= Cosine (X) is negative indicating motion away								
= from the target surface.								
= Cosine (Y) and Cosine (Z) are transverse motion.								
=====								
===== CALCULATION DATA =====								
Xe(1 keV) ==> Si(100 A)								
Ion Numb	Atom Numb	Energy (eV)	Depth Lateral-Position			Atom Direction		
			X (A)	Y (A)	Z (A)	Cos (X)	Cos (Y)	Cos (Z)
1	1	2219	00E+00	-.397E+01	.174E+02	-.73966	-.45399	.49676
1	1	2281	00E+00	-.391E+01	.143E+02	-.56877	-.43337	-.69906
1	1	222	00E+00	-.758E+01	.161E+02	-.92030	.02871	.39015
1	1	223	00E+00	-.835E+01	.152E+02	-.39997	.77688	.48627