ВЛИЯНИЕ БОМБАРДИРОВКИ ИОНАМИ ГЕЛИЯ И НЕОНА НА СТРУКТУРНУЮ КОМПОЗИЦИЮ «НАНОРАЗМЕРНАЯ ПЛЕНКА НИТРИДА АЛЮМИНИЯ – АЛЮМИНИЙ»

Д.К. Никифоров^{1,2}, А.П. Коржавый³, К.Г. Никифоров¹, Г.Г. Бондаренко⁴

¹ Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского; ² Филиал Всероссийского заочного финансово-экономического института, Калуга; ³ Филиал Московского государственного технического университета им. Н.Э.Баумана, Калуга; ⁴Московский государственный институт электроники и математики (технический университет)

E-mail: dm nikif@rambler.ru

В настоящее время важной проблемой является весьма создание высокоэффективных Эмитирующие наноструктуры холодных катодов. «металл – диэлектрик» являются основой высокоэффективных электронных эмиттеров – холодных катодов [1,2]. При этом диэлектрический нанослой не только несёт конструктивную защитную функцию, но и служит активным – функциональным элементом электронного устройства [2]. В качестве материала для такого слоя обычно используется оксид алюминия Al₂O₃, сочетающий высокие температуру плавления, теплопроводность И диэлектрические параметры, но перспективен также и оксид бериллия ВеО, теплопроводность которого втрое выше [3]. В то же время несомненны и преимущества нитрида алюминия AlN, к которым относится практическая такая же большая теплопроводность, как у ВеО, но без высокой токсичности, характерной для последнего [4].

Следует отметить, что AlN относится к уникальным материалам с отрицательным электронным сродством [5,6]; это означает, что процесс эмиссии электронов в вакуум с его поверхности не ограничен потенциальным барьером. Имеются некоторые данные о возможности применения AlN как эффективного эмиттера электронов – холодного катода вакуумных и газоразрядных устройствах. Так, по данным Ши и др. [7], полевая эмиссия из AlN обеспечивает эмиссионные токи плотностью до 1 A/м² в полях до 8·10⁶ В/м, в первом приближении описываемые теорией Фаулера-Нордгейма. Соуэрс и др. [8] создали холодный катод, используя AlN в качестве тонкопленочного (100 нм) эмитирующего слоя; при напряжении до 110 В наблюдались эмиссионные токи плотностью до 2·10⁴ A/м, описываемые механизмом Фаулера-Нордгейма.

Ранее [9] мы провели компьютерное моделирование эмиссионных свойств наноструктур Al-AlN и показали, что при относительно небольших внешних

полях туннельные токи Фаулера-Нордгейма в этих структурах на 2-3 порядка больше, чем в Al–Al₂O₃.

В то же время необходимо учитывать, что при практическом использовании подобных эмитирующих структур – в реальных условиях тлеющего разряда (например, в He-Ne лазерах) – возникает опасность модификации свойств поверхности и объёма диэлектрического нанослоя под действием ионной бомбардировки [2,10].

Нами проводился вычислительный эксперимент по исследованию катодного распыления поверхности и ионного внедрения в объём диэлектрика наноструктуры металл – нитрид металла в условиях Не-Ne газового разряда. Все расчеты проводились на основе системы компьютерной математики *Maple* 9. Следует отметить, что в нашем случае наноразмерного диэлектрического слоя нельзя пренебречь его возможным распылением даже при относительно малых энергиях бомбардирующих ионов.

Компьютерное моделирование ионной имплантации наноструктур проводилось в рамках теории Линдхарда–Шарфа–Шиотта [11, 12] с учётом того, что рассеяние бомбардирующих ионов в твёрдотельной мишени описывается гауссовым распределением (при малых бомбардирующих дозах ионов и поликристалличности мишени). На рис. 1 и 2 представлены полученные распределения внедрённых ионов Не и Ne в объёме нанослоя AlN при различных уровнях их начальной энергии.



Рис. 1. Распределение имплантированных ионов гелия по глубине нанослоя AlN в зависимости от их начальной энергии E_{i0}: 25 (1), 50 (2), 75 (3) и 100 эВ (4)

Проведённый нами вычислительный эксперимент демонстрирует, что для значений начальной энергии ионов 50-100 эВ глубина проникновения ионов Не и Ne отличается примерно на порядок. Так, при энергии бомбардирующих

ионов $E_{i0} = 100$ эВ глубины их проникновения в AlN составляют 5,68 и 0,46 нм для Не и Ne соответственно. Следовательно, ионы неона модифицируют лишь приповерхностный слой нитрида, а ионы гелия проникают в объем нанослоя на глубину, сопоставимую с его толщиной.

Из сравнения результатов проведённого нами моделирования ионного внедрения для структур на основе различных диэлектриков [10] видно, что пробег имплантированных ионов уменьшается, а максимум их распределения располагается ближе к поверхности нанослоя в ряду BeO – AlN – Al₂O₃. Это обусловлено снижением тормозной способности ядер при возрастании молярной массы вещества мишени (как и при уменьшении массы бомбардирующего иона).



Рис. 2. Распределение имплантированных ионов неона по глубине нанослоя AlN в зависимости от их начальной энергии E_{i0}: 25 (1), 50 (2), 75 (3) и 100 эВ (4)

Для поликристаллических материалов и при энергии бомбардирующих ионов менее 1 кэВ коэффициент распыления обычно рассчитывается в рамках теории Зигмунда [2, 11]. Однако она не учитывает наличие пороговой энергии распыления твёрдого тела, подтверждаемое многочисленными данными [12]. В экспериментальными связи С ЭТИМ проводили МЫ компьютерное моделирование катодного распыления на основе модифицированной теории Фальконе-Зигмунда [13], которая учитывает роль поверхности в распылении и даёт следующее выражение для коэффициента распыления:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0 \left(1 - \frac{\mathbf{E}_{th}}{\mathbf{E}}\right)^2,$$

где E – энергия бомбардирующего иона, E_{th} – пороговое значение энергии распыления, Y_0 – коэффициент распыления по теории Зигмунда [12]. Заметим, что при малых значениях энергии ($E \approx E_{th}$) $Y \rightarrow 0$, а при больших начальных

значениях энергии ($E >> E_{th}$) $Y \to Y_0$, то есть уравнение описывает зигмундовский коэффициент распыления.

При этом порог распыления определялся по модели Кейвелла [14]:

$$E_{th} = \frac{E_d}{\gamma} = \left(\frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}\right)^{-1} E_d$$

где γ – максимальная часть энергии первоначальных (бомбардирующих) частиц, которая может перейти к атомам мишени при столкновении, E_d – энергия смещения атомов в мишени или энергия связи атомов на поверхности (для AlN E_d = 6,8 эВ [15]), M_1 – масса бомбардирующего иона, M_2 – масса атомов мишени.

На рис.3 представлены результаты компьютерного моделирования катодного распыления нанослоя AlN под действием бомбардирующих ионов Не и Ne при различных уровнях их начальной энергии.



Рис. 3. Зависимости коэффициентов распыления слоев AlN от энергии бомбардирующих ионов He (1) и Ne (2)

Полученные результаты моделирования показывают, что коэффициент распыления AlN под действием ускоренных ионов Не и Ne с энергией 100 эВ составляет 0,04 и 0,14 соответственно.

Следует иметь в виду, что при ионной бомбардировке бинарных оксидов металлов наблюдается ещё и преимущественное распыление одного из компонентов (обычно более легкого), обусловленное их различиями в атомной массе и поверхностной энергии связи [16]. Так, по данным моделирования, в случае бомбардировки AlN ионами He и Ne происходит преимущественный выход ионов азота как более легкого компонента: у него больше средняя длина свободного пробега в твердом теле, и он может быть эмитирован с большей глубины. Это должно вести к росту числа анионных вакансий в поверхностном слое.

Таким образом, результаты проведённого компьютерного моделирования показывают, что под действием бомбардировки ионами гелия и неона происходит модификация как поверхности, так и практически всего объёма нанослоя. При этом ионы гелия преимущественно проникают в глубину слоя, формируя структурные дефекты, а ионы неона в основном обеспечивают распыление вещества нанослоя.

Для формирования эффективной электронной эмиссии изученных структур необходимо уменьшать толщину диэлектрического нанослоя (AlN) [2], однако в реальных условиях ионной бомбардировки эта возможность будет ограничена ≈ 5 нм. Полученные результаты компьютерного моделирования физических свойств наноструктур Al–AlN могут быть использованы для улучшения физико-технических параметров высокоэффективных наноразмерных холодных катодов газовых лазеров.

- А.П. Коржавый, В.П. Марин, А.С. Сигов. Некоторые аспекты создания технологий и конструкций изделий квантовой электроники // Наукоемкие технологии. – 2002. – Т.3, № 4. – С.20-31.
- 2. Д.К. Никифоров, А.П. Коржавый, К.Г. Никифоров Эмитирующие наноструктуры «металл – оксид металла»: физика и применение. – Москва: изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. – 156 с.
- 3. Г.Г. Бондаренко, А.П. Коржавый, Д.К. Никифоров, Г.А. Чистяков. Создание эффективных холодных катодов из алюминия и бериллия // Перспективные материалы. 2007. Т.1, №2. С.23-28.
- 4. В.Н. Суховский, А.П. Коржавый, В.Е. Кочурихин. Нитриды переходных металлов перспективные матералы для долговечных пленочных катодов // Электронная техника. Сер. Материалы. 1989. Вып. 6. С.70-71.
- M.C. Benjamin, Wang Ch., R.F. Davis, R.J. Nemanich. Observation of a negative electron affinity for heteroepitaxial AlN on α(6H)-SiC(0001) // Appl. Phys. Lett. – 1994. – Vol.64, #24. – P.3228-3290.
- Y. Taniyashi, M. Kasu, T. Makimoto. Field emission properties of heavily Si-doped AlN in triode-type display structure // Appl. Phys. Lett. – 2004. – Vol.84, #3. – P.2115-2117.
- S.C. Shi, C.F. Chen, H.Y. Li, J.T. Lo, Z.H. Lan, K.H. Chen, L.C. Chen. Field emission from quasi-aligned aluminium nitride nanotips // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol.87, #7. – P.3109-3112.
- A.T. Sowers, J.A. Christman, M.D. Bremser, B.L. Ward, R.F. Davis. Thin films of aluminium nitride and aluminium gallium nitride for cold cathode application // Appl. Phys. Lett. – 1997. – Vol.71, #16. – P.2289-2291.
- Д.К. Никифоров, А.П. Коржавый, К.Г. Никифоров. Компьютерное моделирование электронной эмиссии в наноструктурах Be-BeO и Al-AlN // Наноинженерия-2010: Труды III Всерос. школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых. – Москва, МИЭМ, 2010. – С. 350-353.
- 10. Г.Г. Бондаренко, Д.К. Никифоров, А.П. Коржавый, К.Г. Никифоров. Моделирование процессов ионного внедрения в наноструктурах Al-Al₂O₃,

инициируемых ионной бомбардировкой в условиях газового разряда // Радиационная физика твёрдого тела: Труды XVII Межд. совещ. Севастополь, 2007 г./под ред. Г.Г.Бондаренко/ - Москва: НИИПМТ МИЭМ (ТУ), 2007. – 426-431.

- 11. Ю.В. Трушин. Радиационные процессы в многокомпонентных материалах. Теория и компьютерное моделирование. СПб.: изд-во ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, 2001.
- 12. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой // Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.; 1986. 488 с.
- 13. Д. Фальконе. Теория распыления // УФН. 1992. Т.162, №1. С.71-117.
- 14. F. Keywell. Measurements and Collision–Radiation Damage Theory of High-Vacuum Sputtering// Phys. Rev. 1955. Vol. 97, #6. P. 1611-1619.
- 15. С.С. Еловиков, Е.Ю. Зыкова, А.С. Мосунов, В.Е. Юрасова, Ю.А. Рыжов, И.И. Шкарбан. Энергетическая и массовая зависимость распыления нитридов и их компонентов // Вопросы атомной науки и техники. 2007. Вып. 2. С.26-31.
- 16. Л. Фельдман, Д. Майер. Основы анализа поверхности тонких плёнок. М.: Мир, 1989. 564 с.