

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ, ИНИЦИИРОВАННОЙ НЕ-НЕ БОМБАРДИРОВКОЙ, В НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ТИТАНА

© 2016 г. Д.К. НИКИФОРОВ<sup>1,2</sup>, А.П. КОРЖАВЫЙ<sup>2</sup>, К.Г. НИКИФОРОВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Калужский филиал Финансового университета при Правительстве РФ,

<sup>2</sup>Калужский филиал Московского государственного  
технического университета им. Н.Э. Баумана,

<sup>3</sup>Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского

### Введение. Цель и задача работы

В современной науке и технике широко используются газоразрядные лазеры, основным элементом которых является эмиттер электронов, поддерживающих разряд, – холодный катод [1], для функционирования которого требуются сильные электрические поля ( $\approx 10^9$  В/м). В качестве основы высокоэффективных электронных эмиттеров в последнее время используются эмитирующие наноструктуры «металл–диэлектрик» [1,2]. Переход к тонкопленочным оксидным катодам позволяет обеспечить надежность, долговечность и миниатюризацию лазерных датчиков.

Диэлектрический нанослой при этом не только несёт конструктивную защитную функцию, но и является активным элементом электронных структур [2]. В оксидных нанопленках практически отсутствуют объёмные дефекты и осуществляются принципиально иные физические механизмы эмиссии электронов и деградации оксидных покрытий. Так, при контакте с металлом свободные носители заряда заполняют весь объём диэлектрической пленки, а приложение поля (способствующего инжекции электронов из металла в диэлектрик) приводит к термоэлектронной эмиссии Пула-Френкеля и автоэлектронной (туннельной) эмиссии Фаулера-Нордгейма [2,3,4].

Оптимальными для создания тонкопленочных холодных катодов материалами являются оксиды и нитриды металлов, сочетающие высокие температуру плавления, теплопроводность и диэлектрические параметры, –  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{BeO}$  [1,2]. В последнее время предпринимаются попытки (см., например, [5-7]) использовать в качестве активного компонента электронных приборов и устройств оксид титана  $\text{TiO}_2$ , отвечающий и вышеуказанным требованиям (так, его диэлектрическая проницаемость достигает 30...80 в зависимости от структурной модификации) [8,9].

При этом, однако, следует учитывать, что в реальных условиях тлеющего разряда (например, в газовых He-Ne лазерах) возникает опасность модификации свойств объёма диэлектрической наноплёнки и интерфейса «металл – диэлектрик» под действием ионной бомбардировки [2].

В данной работе проводится моделирование ионного внедрения и анализ возможных процессов модификации и деградации наноструктур  $\text{Ti-TiO}_2$  в сравнении с ранее изученными нами  $\text{Al-Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Al-AlN}$  и  $\text{Be-BeO}$  [10,11].

### Метод исследования

Нами проводился вычислительный эксперимент по исследованию ионного внедрения в объём диэлектрика наноструктуры металл – оксид металла в условиях He-Ne газового разряда. Все расчеты осуществлялись на основе системы компьютерной математики *Maple*. Компьютерное моделирование ионной имплантации наноструктур проводилось в рамках теории Линхарда–Шарфа–Шиотта [12,13]. В поликристаллической твёрдотельной мишени при малых дозах бомбардирующих ионов их рассеяние

описывается гауссовым распределением, и профиль распределения концентрации внедренных ионов  $N(x)$  определяется следующей моделью:

$$\frac{N(x)}{N_i} = \frac{3(M_i + M_s)}{5\sqrt{M_i M_s} R_p} e^{-\frac{3(M_i + M_s)^2 (x - R_p)^2}{4M_i M_s R_p^2}}$$

где  $R_p$  – проекция пробега частицы на нормаль к поверхности, определяющая глубину внедрения иона  $x$ ,  $M_i$  и  $M_s$  – атомные массы бомбардирующего иона и иона «мишени»,  $N_i$  – концентрация бомбардирующих ионов.

Величина  $R_p$  при условии  $M_i < M_s$

$$R_p \approx \frac{R}{1 + \frac{M_s}{3M_i}}, \quad R = \frac{E_{i0}}{\left(\frac{dE_i}{dx}\right)} = \frac{2\alpha(Z_i^{2/3} + Z_s^{2/3})^{1/2} M_i + M_s}{N_s Z_i Z_s} E_{i0}$$

где  $R$  – полный пробег иона в твердом теле,  $E_{i0}$  и  $Z_i$  – начальная энергия и атомный номер бомбардирующего иона,  $N_s$  и  $Z_s$  – концентрация и атомный номер вещества «мишени»,  $\alpha = 2,88 \cdot 10^{26}$  Дж/м<sup>2</sup>.

### Результаты исследования

На рис. представлены результаты компьютерного моделирования ионной имплантации в нанослой  $TiO_2$  под действием бомбардирующих ионов He и Ne при различных уровнях их начальной энергии.

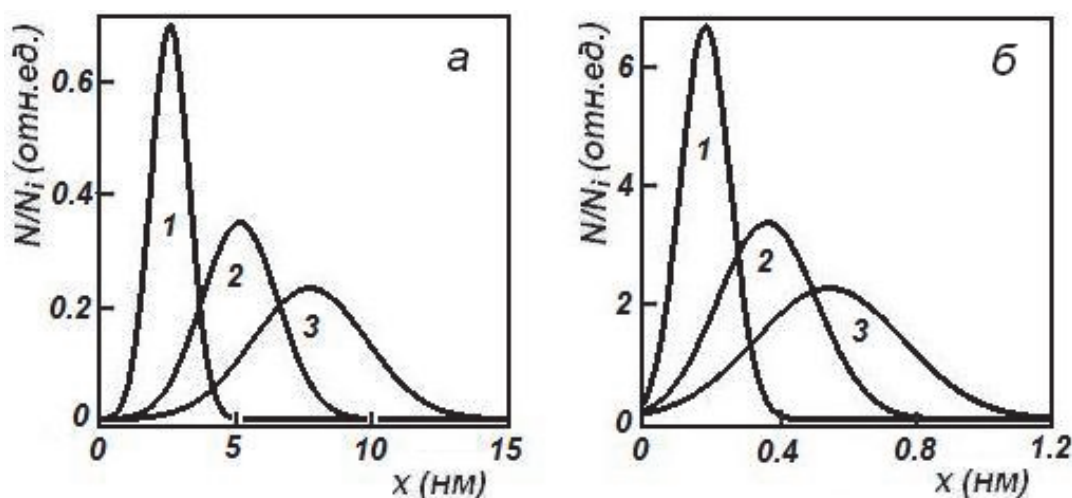


Рис. 1. Распределение имплантированных ионов He (а) и Ne (б) по глубине нанослоя  $TiO_2$  в зависимости от их начальной энергии  $E_{i0}$ : 50 (1), 100 (2), 150 эВ (3).

Расчёты в рамках модели, описанной выше, показали, что для исследованного диапазона значений начальной энергии бомбардирующих ионов глубина проникновения в  $TiO_2$  ионов He и Ne отличается в 10-15 раз (5,11 и 0,36 нм при  $E_{i0} = 100$  эВ), что сравнимо с соответствующими параметрами для наноструктур на основе BeO и AlN [10,11]. Ионы неона модифицируют лишь поверхность оксида, а ионы гелия проникают в объём диэлектрического нанослоя на глубину, сопоставимую с его толщиной.

Как показано нами ранее (см., например, [3,4]), для формирования эффективной электронной эмиссии изученных структур необходимо уменьшать толщину диэлектрического нанослоя. Однако в реальных условиях ионной бомбардировки эта возможность будет ограничена [10,11]  $\approx 10$  нм для Al– $Al_2O_3$  и  $\approx 5$  нм для Be–BeO и Al–AlN. Результаты проведённого моделирования пробега и профиля распределения имплантированных ионов в наноструктуре Ti– $TiO_2$  (рис.) показывают, что с увеличением началь-

ной энергии бомбардирующих ионов практически весь объем нанослоя толщиной в 5-10 нм также оказывается имплантированным ионами гелия, то есть происходит его модификация.

### Выводы

На основе системы компьютерной математики *Maple* проведен вычислительный эксперимент по исследованию ионной имплантации в нанослои структур Ti-TiO<sub>2</sub> под действием He-Ne газового разряда. Результаты данного эксперимента демонстрируют, что даже при малых энергиях бомбардирующих ионов в наноразмерных эмитирующих структурах необходимо учитывать возможную деградацию нанослоя, вызванную ионной имплантацией. Полученные результаты компьютерного моделирования физических свойств наноструктур Ti-TiO<sub>2</sub> могут быть использованы для улучшения физико-технических параметров высокоэффективных наноразмерных холодных катодов газовых лазеров.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коржавый А.П., Марин В.П., Сигов А.С. Некоторые аспекты создания технологий и конструкций изделий квантовой электроники // Научные технологии. – 2002, т. 3, № 4, с. 20-31.
2. Никифоров Д.К., Коржавый А.П., Никифоров К.Г. Эмиттирующие наноструктуры «металл – оксид металла»: физика и применение. – Москва: изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. – 156 с.
3. Никифоров Д.К., Коржавый А.П., Никифоров К.Г. Влияние диэлектрического нанослоя на эмиссионные свойства структур Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Be-BeO // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. – 2009, № 11(79), с. 153-159.
4. Никифоров Д.К., Коржавый А.П., Никифоров К.Г. Моделирование процессов инжекции и эмиссии носителей заряда в наноструктурах на основе нитрида алюминия // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения. – 2012, т. 12, № 2, с. 58-60.
5. Hague S.A., Koops S., Tokmoldin N., Durrant J.R., Huang J., Bradley D.D.C., Palomares E. A multilayered polymer light-emitting diode using a nanocrystalline metal-oxide film as a charge-injection electrode // Adv. Mater. – 2007, v.19, p. 683-687.
6. Chen P.-Ch., Hsieh Sh.-J., Zou J., Chen Ch.-Ch. Selectively dealloyed Ti/TiO<sub>2</sub> network nanostructures for supercapacitor application // Mater. Lett. – 2014, v.133, p.175-178.
7. Barrera-Patino C.P., Quiroz H.D., Rey-Gonzalez R.R., Dussan A. Photonic effect on nanostructures in the Ti-TiO<sub>2</sub> interphase // Adv. Mater. Lett. – 2016, v.7(10), p. 802-805.
8. Vasudevan D. The effect of cathode materials on the electrochemical reduction of nitric acid // Pol. J. Chem. Technol. – 2010, v. 1, p.35-37.
9. Alivov Y., Klopfer M., Molloy S.Y. TiO<sub>2</sub> nanotubes as a cold cathode for X-ray generation // Appl. Phys. Lett. – 2010, v. 96, # 24, p.243502.
10. Никифоров Д.К., Коржавый А.П., Никифоров К.Г. Вычислительный эксперимент в наноструктурах Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Al-AlN и Be-BeO: моделирование ионной имплантации, инициированной He-Ne газовым разрядом // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения. – 2010, т. 10, № 2, с. 76-78.
11. Никифоров Д.К., Коржавый А.П., Никифоров К.Г., Бондаренко Г.Г. Поверхностная и объемная модификация эмитирующих наноструктур Al-AlN и Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ионной бомбардировкой // Известия вузов. Физика. – 2013, т. 56, № 1-2, с. 23-26.
12. Трушин Ю.В. Радиационные процессы в многокомпонентных материалах. Теория и компьютерное моделирование. – Санкт-Петербург: изд-во ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, 2001. – 384 с.
13. Кожитов Л.В., Косушкин В.Г., Крапухин В.В., Пархоменко Ю.Н. Технология материалов микро- и нанoeлектроники. – Москва: изд-во МИСиС, 2007. – 542 с.