

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи



Лукьянцев Денис Сергеевич

**МЕТОД КОНТРОЛИРУЕМОГО
ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
МЕТАЛЛ-ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК**

Специальность 1.3.5. Физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2024

Работа выполнена на кафедре общей физики и ядерного синтеза федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ».

Научный руководитель – Лубенченко Александр Владимирович,
доктор технических наук

Официальные оппоненты – Крупенин Владимир Александрович,
доктор физико-математических наук,
МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики полупроводников и криоэлектроники, лаборатория «Криоэлектроника», ведущий научный сотрудник

Новодворский Олег Алексеевич,
доктор физико-математических наук, доцент,
НИЦ «Курчатовский институт» «Курчатовский Комплекс «Кристаллография и фотоника» (КККиФ), отделение ИПЛИТ – Шатура, лаборатория наноструктур и оптических покрытий, заведующий лабораторией

Шерстюк Наталия Эдуардовна,
доктор физико-математических наук, доцент,
РТУ МИРЭА, институт перспективных технологий и индустриального программирования, кафедра наноэлектроники, профессор

Защита диссертации состоится «06» марта 2025 г. в ___-___ на заседании диссертационного совета МГУ.013.7 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2, Физический факультет МГУ, ауд.____.

E-mail: igorkartashov@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д.27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/3303>.

Автореферат разослан « ___ » _____ 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
к.ф.-м.н.

 И.Н. Карташов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования.

Многослойные окисленные металлические тонкие и ультратонкие пленки находят широкое применение в современных устройствах благодаря высокому разнообразию их физико-химических свойств, варьирующихся в широких пределах. Пленки на основе оксидов металлов имеют развитую фазовую диаграмму, многообразие кристаллических структур и дефектов, а также возможность точного управления их физическими и химическими свойствами через изменение состава и структуры. Основными областями применения металл-оксидных пленок являются энергетика, сенсорные технологии, биомедицина и электроника.

Металл-оксидные пленки играют важную роль в улучшении эффективности преобразования энергии в солнечных элементах и применяются в литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах в качестве электродных материалов, в электрохромных устройствах для интеллектуальных энергоэффективных окон, для создания высокочувствительных датчиков газа, в технологиях очистки воды, для изготовления биосовместимых покрытий.

В электронике тонкие пленки широко используются в транзисторах и диодах. Особое внимание привлекают исследования по применению тонких металл-оксидных пленок в мемристорах — элементах памяти нового поколения. Мемристоры — это пассивные нанoeлектронные устройства, которые демонстрируют свойство мемристивности, то есть способность изменять свое сопротивление в зависимости от истории протекавшего через них тока. Такие устройства состоят из электродов и активных слоев толщиной несколько нанометров. Активные слои, в свою очередь, состоят из слоев высшего оксида и субоксидов металла.

Функциональность электронных устройств определяется их электрическими свойствами, которые зависят от химического состава неоднородных металл-оксидных слоев, их толщины и очередности расположения, наноразмерной шероховатости поверхности. Поэтому для создания устройств со стабильно повторяющимися свойствами и высокой надежностью необходимо развитие соответствующей

технологии производства, которая позволила бы управлять параметрами активных слоев не только в процессе их формирования, но и в готовых структурах.

Таким образом, для решения этой актуальной задачи требуются чувствительные неразрушающие методы исследования наноструктурированных пленок, позволяющие определять послойный химический состав с субнанометровой точностью, и методы формирования неоднородных оксидных и субоксидных слоев, необходимых для корректной работы устройства.

Степень разработанности темы исследования.

В настоящее время работы ведутся как в области методов изготовления активных слоев для современных устройств, так и их исследования. Для применения в мемристивных устройствах металл-оксидные пленки зачастую изготавливают следующими методами: реактивное магнетронное напыление, атомно-слоевое осаждение, химическое вакуумное осаждение, импульсное лазерное осаждение. Данные методы не позволяют изменять химический состав уже созданных слоев.

Исследования показывают, что наиболее перспективным методом изменения параметров слоев является облучение поверхности ионами аргона. Варьируя параметры ионного облучения (энергия пучка, угол облучения, ионный ток, длительность облучения), можно влиять на химический состав образца. Проведенный анализ работ по данному направлению исследования указывает на отсутствие рекомендаций по выбору параметров облучения для создания желаемой металл-оксидной структуры. Безусловно, одной из главных причин является ограниченность применяемых подходов исследования, которые не позволяют одновременно определять химический фазовый состав поверхностных слоев, их толщины, очередность следования, а также степень шероховатости поверхности.

Для получения сведений о составе и структуре поверхности применяют различные методы анализа. Однако большинство из них являются разрушающими или неинформативными в данном случае. Наиболее подходящий – неразрушающий метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) с угловым разрешением, который позволяет исследовать поверхностные слои с высокой точностью.

Существующие методы интерпретации рентгеновских фотоэлектронных спектров имеют свои ограничения, особенно при анализе неоднородных металл-

оксидных пленок. Основная сложность заключается в неоднозначной интерпретации спектров, что затрудняет точное определение химического состава. Одни методы базируются на упрощённых моделях гладкой поверхности, что приводит к значительным погрешностям при анализе неровных пленок. Другие учитывают наноразмерные шероховатости, но обладают существенными недостатками, не позволяя определить послойный химический фазовый состав.

Анализ совокупности доступных данных указывает на актуальность как развития метода формирования оксидных слоев необходимого состава, диктуемого функциональностью устройства, так и разработки чувствительного метода их исследования.

Целью диссертационного исследования является разработка метода формирования наноструктурированных металл-оксидных пленок с *in situ* контролем их послойного химического фазового состава.

Задачи диссертационного исследования:

1. Применение и адаптация метода послойного химического фазового анализа, основанного на модели плоскопараллельных слоев мишени, для исследования неоднородных металл-оксидных ультратонких пленок.

2. Решение задачи фотоэлектронной эмиссии от многослойных многокомпонентных мишеней с различными по форме наноструктурированными неоднородностями на их поверхности.

3. Экспериментальное определение послойного фазового состава неоднородной тонкой металл-оксидной пленки, включая параметры наноструктурированного поверхностного слоя. Верификация полученных результатов.

4. Исследование различных режимов ионного воздействия на тонкую металл-оксидную пленку. Выделение и оптимизация режимов: распыление, модифицирование и окисление.

5. Контролируемое создание неоднородных многокомпонентных многослойных металлических пленок с помощью применения многоэтапных режимов воздействия ионами аргона и атмосферного окисления.

Объектом исследования являются многокомпонентные многослойные тонкие металл-оксидные пленки с наноразмерными шероховатостями на поверхности.

Предметом исследования являются метод формирования многокомпонентных наноструктурированных металл-оксидных пленок и определения их послойного химического фазового состава.

Научная новизна работы.

Научная новизна работы обусловлена тем, что в ней впервые:

- Предложен новый многоэтапный алгоритм химического анализа металл-оксидных ультратонких пленок, основанный на модели мишени с плоскопараллельными слоями, с помощью метода РФЭС с угловым разрешением, который позволяет определить послойный химический фазовый состав с субнанометровой точностью.

- Впервые получена аналитическая формула для расчета функции фотоэлектронной эмиссии от многослойной мишени с периодическими наноструктурами на поверхности с учетом эффекта затенения поверхности в приближении «прямо вперед», позволяющая однозначно оценить вклад данного эффекта в формирование фотоэлектронного спектра.

- Впервые предложен и апробирован численный метод расчета функции фотоэлектронной эмиссии от слоисто-неоднородной металл-оксидной пленки со стохастической наноструктурированной поверхностью, применение которого для решения обратной задачи рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии позволяет определить средние размерные параметры поверхностного слоя (средняя толщина слоя, максимальная толщина и дисперсия толщины);

- Выделены и оптимизированы два режима облучения ионами аргона поверхности пленки – модифицирование и распыление, которые приводят к «послойной» модификации пленки. Режим модифицирования приводит к изменению химического фазового состава поверхности, а режим распыления позволяет эффективно влиять на толщину оксидных слоев;

- Впервые разработан метод контролируемого формирования наноструктурированных ультратонких металл-оксидных пленок с помощью различных режимов облучения ионами аргона и атмосферного окисления при мониторинге их послойного химического фазового состава с субнанометровой точностью.

Теоретическая и практическая значимость работы.

- Применение предложенных подходов послойного химического фазового анализа наноструктурированных многослойных металл-оксидных пленок с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением может быть полезно для определения оптимальных параметров пленок, при которых наблюдается стабильная работоспособность устройств электроники и наноэлектроники, созданных на их основе.
- Разработанные методы послойного химического фазового анализа могут быть применены для исследования неоднородных наноструктурированных покрытий конструкционных материалов энергетических установок и поверхности материалов, востребованных в биомедицине.
- Полученные результаты представляют интерес с точки зрения развития фундаментальных представлений о стадиях формирования оксидных структур на поверхности многослойных наноструктурированных металл-оксидных пленок при ионном облучении и атмосферном окислении.
- Предложенный метод контролируемого формирования многокомпонентных наноструктурированных металл-оксидных пленок может быть востребован при разработке и построении замкнутой системы управления технологическим процессом производства изделий с заданными свойствами поверхностных слоев, например, мемри-стивных структур.
- Результаты диссертационной работы используются в учебном процессе в ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» при подготовке лекций и лабораторного практикума по дисциплинам «Исследование поверхности в условиях вакуума и низких температур» и «Имитационное моделирование плазменных процессов».

Методология диссертационного исследования.

В работе использовались как экспериментальные методики, так и компьютерное моделирование. Формирование неоднородных многокомпонентных многослойных металлических пленок и их исследование с помощью метода РФЭС с угловым разрешением проводились *in situ* на модуле электронно-ионной спектроскопии на базе платформы Нанофаб 25 (НТ-МДТ). Сведения о рельефе поверхностного слоя пленок получены с помощью атомно-силового микроскопа NT-MDT NTEGRA.

Использованы методы математического моделирования на основе общеизвестных уравнений переноса частиц в твердом теле, решение этих уравнений производилось с помощью численных методов. Моделирование распыления проведено с помощью программного пакета TRIM 2013.

Положения, выносимые на защиту.

- Разработанный многоэтапный алгоритм химического анализа поверхности твердого тела, который основан на модели мишени с плоскопараллельными слоями, позволяет определить послойный химический фазовый состав металл-оксидных ультратонких пленок с субнанометровым разрешением.
- Полученные аналитические выражения для фотоэлектронной эмиссии от мишеней с периодическими и стохастическими поверхностными неоднородностями, учитывающие многократное неупругое рассеяние фотоэлектронов, позволяют рассчитывать рентгеновские фотоэлектронные спектры в широком диапазоне потерь энергии для различных углов визирования.
- Метод определения послойного химического фазового состава неоднородных пленок с наноразмерной шероховатой поверхностью на основе рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением позволяет определить не только фазовый профиль мишени, но и средние размерные параметры шероховатости пленки (средняя толщина слоя, максимальная толщина и дисперсия толщины). Метод основан на модели многослойной мишени со стохастическим поверхностным слоем.
- Выделены и оптимизированы два основных режима ионного облучения поверхности пленки: модифицирование и распыление. Режим модифицирования (флюенс – менее $1,3 \cdot 10^{15}$ ион/см², начальная энергия ионов – 0,5 кэВ, угол падения ионов от нормали к поверхности – 70°) приводит к кислородному обеднению оксидных слоев без существенного изменения их толщин за счет более интенсивного распыления атомов кислорода мишени. Режим распыления (флюенс – $5 \cdot 10^{15}$ ион/см², начальная энергия ионов – 1,0 кэВ, угол падения ионов от нормали к поверхности – 70°) приводит не только к модифицированию поверхности, но и позволяет эффективно изменять толщину слоя.
- Метод контролируемого формирования наноструктурированных металл-оксидных пленок, основанный на чередовании различных режимов модифицирования,

распыления и кратковременного окисления, позволяет создавать неоднородные многослойные пленки с известным химическим фазовым составом по глубине.

Достоверность результатов обеспечивается отсутствием противоречий с имеющимися экспериментальными и теоретическими литературными данными по тематике диссертации в тех случаях, когда такие данные имеются; подтверждена сравнением полученных результатов с другими экспериментальными методами исследования поверхности.

Апробация результатов. Основные положения и результаты проведенных исследований были представлены и обсуждены на следующих конференциях:

- 7th International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures (S-Petersburg, 2020).
- XXVI-XXX Международная научно-техническая конференция студентов и аспирантов «Радиоэлектроника, электротехника и энергетика» (Москва, 2020-2024).
- 2th, 3th International Youth Conferences on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (Moscow, 2020-2021).
- III International Conference on Information Technologies in Engineering Education «Inforino» (Moscow, 2020).
- XXVI-XXVIII симпозиум «Нанозифика и нанозлектроника» (Нижний Новгород, 2022-2024).
- Молодежная школа-конференция «Наноструктуры. Свойства и применения» (Санкт-Петербург, 2022).
- XVII Курчатовская молодежная междисциплинарная научная школа (Москва, 2023).
- 52, 53 Международная Тулиновская конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 2023-2024).
- XXVI, XXVII конференция «Взаимодействие плазмы с поверхностью» (Москва, 2023-2024).
- XXVI Международная конференция «Взаимодействие ионов с поверхностью» (Ярославль, 2023).
- III Международная конференция «Проблемы термоядерной энергетии и плазменные технологии» (Гаруса, 2023).

Личный вклад автора в получение результатов.

Вклад автора заключается в разработке модели фотоэлектронной эмиссии от мишени с периодическими и стохастическими наноструктурами на поверхности с учетом эффекта затенения поверхности, разработке программы моделирования фотоэлектронной эмиссии от неоднородных наноструктурированных мишеней, исследовании пленок методом РФЭС с угловым разрешением, проведении экспериментов по распылению и модифицированию поверхности ионами аргона, исследовании поверхности образцов методом атомно-силовой микроскопии, разработке метода интерпретации полученных рентгеновских фотоэлектронных спектров, анализе рентгеновских фотоэлектронных спектров полученных экспериментально и в результате моделирования. Все результаты, вынесенные на защиту, получены соискателем самостоятельно, либо на паритетной основе с соавторами. Подготовка публикаций и докладов выполнена лично автором, либо при его активном участии.

Публикации. По результатам проведенных исследований опубликовано 15 работ, в том числе 5 статей в рецензируемых журналах, индексируемых RSCI/Web of Science/Scopus, 8 статей в сборниках конференций, индексируемых Scopus, 2 свидетельства о государственной регистрации программы для электронных вычислительных машин (ЭВМ).

Структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения. Общий объем диссертации 152 страницы печатного текста, включающих 57 рисунков и 7 таблиц. Библиография содержит 215 наименований.

Основное содержание диссертации

Во введении отражена актуальность работы и основные положения диссертации. Сформулированы цели и задачи работы, определены методы их достижения. отражены научная новизна и практическая значимость работы, отмечен личный вклад соискателя, и приведены данные об апробации работы и практической реализации ее результатов.

В первой главе представлен литературный обзор, посвященный теме диссертационного исследования. Рассмотрены перспективы исследования, создания и модификации металл-оксидных тонких пленок. Отмечена перспективность применения кислородно-ниобиевых тонких пленок. Описаны кислородно-

ниобиевые системы и их различные стехиометрические и нестехиометрические фазы. Приведен анализ работ, посвященный методам модификации поверхности металл-оксидных тонких пленок и методам их исследования. Рассмотрено применение метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии для послойного химического фазового анализа ультратонких металлических пленок.

Вторая глава [A1, A2, A3, A5-A10, A12, A13] посвящена развитию послойного химического фазового анализа многокомпонентных тонких металл-оксидных пленок, основанного на модели мишени с плоскопараллельными слоями, с помощью РФЭС с угловым разрешением. В данной главе представлены особенности применения и развитие метода анализа [1], который состоит из методов: вычитания фона многократно неупругорассеянных фотоэлектронов; деконволюции спектральной фотоэлектронной линии; определения послойного профиля.

Исследовано влияние метода вычитания фона многократно неупругорассеянных фотоэлектронов на результаты анализа. Рассмотрены следующие подходы: Ширли-Проктор-Шервуд [2], Тугаард [3] и Лубенченко [4]. Для расчета фона параметры дифференциального сечения неупругого рассеяния определены из экспериментальных данных. Предложено функцию неупругих потерь энергии потоком фотоэлектронов при прохождении неоднородной среды описывать с помощью двух составляющих, описывающих потери энергии на возбуждение колебаний плазмы, не только на поверхности слоя, но и в его объеме [5, 6].

Для решения задачи деконволюции спектральной фотоэлектронной линии многокомпонентной пленки предлагается многоэтапный алгоритм, который основан на совместной обработке спектров для трех различных углов зондирования. Определяются только интенсивности и энергии связи группы оксидных пиков, относящихся к различным фазам. Фотоэлектронный спектр представляется набором групп связанных пиков, относящихся к различным фазам оксида. Форма пиков определяется сверткой функций Доньях-Сунжича [7] и Гаусса, описывающих естественную форму линии, уширения рентгеновской пушки и энергоанализатора. Учитываются дуплетная структура фотоэлектронных пиков и сателлитные пики. Энергия спин-орбитального взаимодействия и собственная ширина фотоэлектронной линии рассчитываются из данных [8]. Энергия связи различных фаз оксида ниобия

определяется из линейной аппроксимации [10] данных NIST XPS [9], для некоторых фаз пентаоксида ниобия [11] их значения уточняются с помощью метода DFT (теории функционала плотности). Применение данного алгоритма позволяет получить высокую точность в описании экспериментального спектра, относительная погрешность составляет не более 1%.

В результате деконволюции спектральной фотоэлектронной линии Nb 3d окисленной ультратонкой пленки ниобия, подвергшейся ионному воздействию, идентифицировано 7 различных химических фаз, которые наилучшим образом описывают экспериментальный рентгеновский фотоэлектронный спектр (рисунок 1). Индекс «x», стоящий перед химическим соединением, указывает на другую кристаллическую структуру фазы оксида.

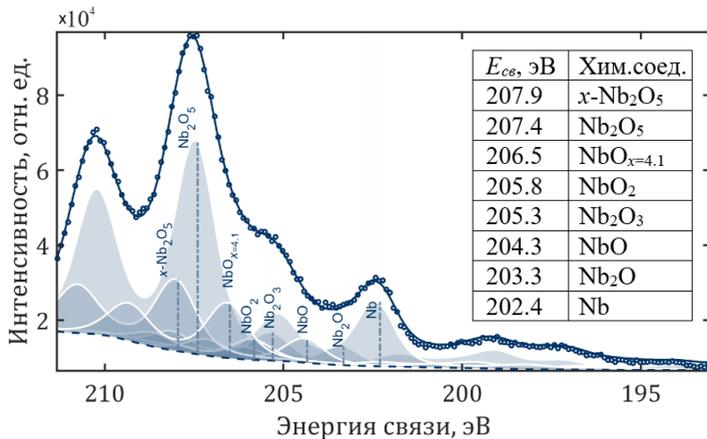


Рисунок 1. Рентгеновский фотоэлектронный спектр линии Nb 3d окисленной пленки ниобия после ионного воздействия при нормальном угле зондирования. Кругами показаны экспериментальные данные, сплошные линии – результаты расчета

Для определения послойного профиля пленки применяется несколько подходов, основанных на анализе: угловой зависимости интенсивностей пиков, результатов многократного определения профиля для разных углов зондирования в модели мишени с различной очередностью слоев для достижения наилучшего совпадения, а также дополнительных сведений об образце [4]. Рассматривается модель мишени, состоящая из плоскопараллельных оксидных слоев, которые могут быть

многофазными [10]. Толщина оксидных слоев определена по формуле [4]. Оценка погрешности показывает, что относительная погрешность толщины оксидного слоя зависит от его фактической толщины и качества выполнения деконволюции спектральной линии. Если рассчитанная толщина оксидного слоя составляет менее ~ 0.5 нм, то ее предлагается интерпретировать как усредненную. В таком случае слой является неоднородным, состоящим из островков или наноразмерных включений. Соседние оксидные слои толщиной менее 0.5 нм объединяются в один эффективный слой.

Результаты послойного химического фазового анализа окисленной ультратонкой пленки ниобия, подвергшейся ионному воздействию, сведены в таблице 1. Неизменность химического состава многокомпонентных слоев и их толщин в пределах погрешности для различных углов зондирования показывает о слоисто однородности мишени.

Таблица 1. Результаты послойного химического фазового анализа пленки ниобия для различных углов зондирования, отсчитанных от нормали

0°		30°		40°		$E_{св}$, эВ
d , нм	Хим.соед.	d , нм	Хим.соед.	d , нм	Хим.соед.	
0.4	0.38 Nb ₂ O ₃ + 0.62 NbO _{x=4.1}	0.5	0.33 Nb ₂ O ₃ + 0.67 NbO _{x=4.1}	0.4	0.33 Nb ₂ O ₃ + 0.67 NbO _{x=4.1}	205.3 206.5
1.1	x-Nb ₂ O ₅	1.0	x-Nb ₂ O ₅	1.0	x-Nb ₂ O ₅	207.9
2.5	Nb ₂ O ₅	2.8	Nb ₂ O ₅	2.8	Nb ₂ O ₅	207.4
0.6	0.42 NbO+ 0.58 NbO ₂	0.6	0.42 NbO+ 0.58 NbO ₂	0.5	0.42 NbO+ 0.58 NbO ₂	204.3 205.8
0.9	Nb ₂ O	0.8	Nb ₂ O	0.8	Nb ₂ O	203.3
–	Nb	–	Nb	–	Nb	202.4
–	SiO ₂ /Si	–	SiO ₂ /Si	–	SiO ₂ /Si	

Третья глава [A2, A3, A4, A11, A13, A14, A15] посвящена разработке метода послойного химического фазового анализа неоднородных пленок с наноструктурированной поверхностью на основе рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. В главе рассматриваются различные подходы анализа пленок с наноразмерными шероховатостями на поверхности.

Для разработки метода анализа пленок с наноразмерной шероховатостью определяется функция фотоэлектронной эмиссии от мишени с наноструктурированной поверхностью с последующим решением обратной задачи по

восстановлению послыйного химического профиля из экспериментальных рентгеновских фотоэлектронных спектров. Функция фотоэлектронной эмиссии $Q(d, \alpha, \theta)$ от слоя толщиной d (α – угол падения фотонов и θ – угол визирования фотоэлектронов, отсчитанные от нормали к поверхности) определяется выражением [3]:

$$Q(d, \alpha, \theta, E) = \int_0^d q(z, \alpha, \theta, E) dz, \quad (1)$$

$$q(z, \alpha, \theta, E) = n \omega_{p \rightarrow e}(\alpha, \theta) T(z, E_0 - \Delta), \quad (2)$$

где $q(z, \alpha, \theta, E)$ – плотность потока фотоэлектронов, рожденных с энергией E_0 на глубине z и вылетевших из слоя с энергией $E = E_0 - \Delta$, n – атомная концентрация атомов слоя, $\omega_{p \rightarrow e}$ – дифференциальное сечение ионизации, $T(z, E_0 - \Delta)$ – функция неупругих потерь энергии потока фотоэлектронов при прохождении неоднородной среды из точки рождения до точки вылета (неупругая функция пропускания).

Для многослойной мишени (рис. 2а), состоящей из N слоев, функция фотоэлектронной эмиссии определяется выражением:

$$Q_{i \dots N}(d_i, \dots, d_N, \alpha, \theta, E) = \int_0^{d_i} q_i(z, \alpha, \theta, E) dz \otimes T_{i+1}(d_{i+1}, E) \otimes \dots \otimes T_N(d_N, E), \quad (3)$$

Неупругая функция пропускания зависит от длины траектории фотоэлектронов в слое вещества z (рис. 2а) и для плоскопараллельного слоя (рис. 2б) может быть определена из численного решения уравнения переноса электронов в приближении прямо-вперед (Straight Line Approximation) [12]. Учитывается различие потерь энергии фотоэлектронов, рожденных с разной кинетической энергией [4].

В главе рассматривается усовершенствование известной модели мишени с периодическими наноструктурами на поверхности [13] и предлагается новая модель – со стохастическими наноструктурами. При рассмотрении модели мишени с периодическими наноструктурами в поверхностном слое (рис. 2в) учитываются эффекты затенения поверхности. Они представляют собой геометрическую особенность, препятствующую однородной эмиссии фотоэлектронов из затененных участков поверхности в направлении энергоанализатора. Неоднородности задаются тремя параметрами: высотой наноструктур d , их средним размером l_0 и

коэффициентом заполнения поверхности $\alpha = l_0/l$. Для нахождения функции фотоэлектронной эмиссии неоднородный слой разделяется на условные области (рис. 2в), в каждой из которых рассеяние описывается одной функцией пропускания.

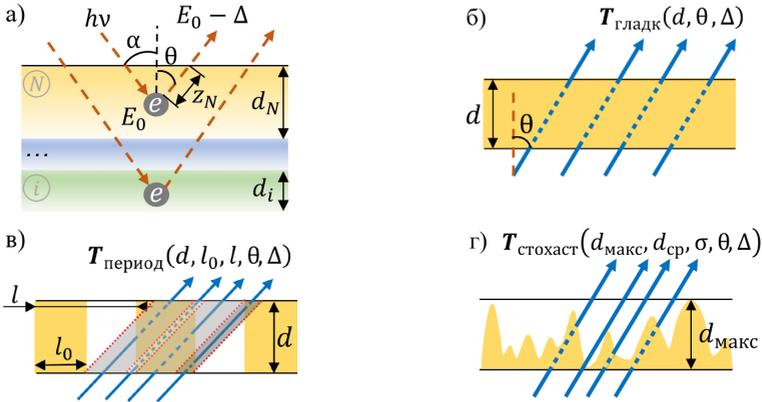


Рисунок 2. а) Схематическое изображение рождения фотоэлектронов в многослойной мишени под действием рентгеновского излучения и траектории их движения в приближении прямо-вперед. Модели мишени с различными формами поверхностного слоя: б) гладкая; в) периодические наноструктуры; г) стохастические наноструктуры

Получено аналитическое выражение функции фотоэлектронной эмиссии от модели многокомпонентной многослойной мишени с периодическими наноструктурами на поверхности. При учете особенностей эффектов затенения поверхности функцию фотоэлектронной эмиссии необходимо определять отдельно для каждого диапазона углов вылета фотоэлектронов. Для неоднородного поверхностного слоя, который состоит из нескольких групп периодических наноструктур с различными параметрами, фотоэлектронная эмиссия может быть определена с помощью принципа суперпозиции с весовыми коэффициентами. При моделировании фотоэлектронной эмиссии используются ранее полученные во второй главе параметры и форма группы связанных пиков. Средняя длина свободного неупругого пробега фотоэлектронов рассчитана по формуле [14]. Для учета упругого рассеяния рассчитывается эффективная длина затухания (Effective Attenuation Length, EAL) [15]. Результаты моделирования фотоэлектронной эмиссии показывают, что учет

эффектов затенения поверхности приводит к значительным изменениям интенсивности спектров для различных углов вылета фотоэлектронов.

Расчитаны теоретические зависимости отношения функций фотоэлектронной эмиссии для разных углов вылета фотоэлектронов от различных параметров поверхностного наноструктурированного слоя многослойной мишени. Их анализ показывает, что, зная отношение интенсивностей для различных углов зондирования, можно приблизительно определить средние размерные параметры периодических наноструктур в поверхностном слое.

Для модели мишени со стохастическим наноструктурированным поверхностным слоем (рис. 2г) неоднородности задаются нормированным нормальным распределением Гаусса. Для описания наноструктур вводятся три параметра: средняя толщина слоя d_{cp} , максимальная толщина d_{max} и дисперсия толщины слоя σ . Получено аналитическое выражение функции пропускания сквозь стохастический наноструктурированный слой (4). По выражениям (1)–(4) определена функция фотоэлектронной эмиссии от многослойной мишени со стохастическим поверхностным слоем.

$$T_{\text{стохаст}}(d_{\text{макс}}, d_{\text{ср}}, \sigma) = \int_0^{d_{\text{max}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(z-d_{\text{ср}})^2}{(2\sigma)^2}} \cdot T_{\text{гладк}}(z, \theta, \Delta) dz, \quad (4)$$

Проведено сравнение результатов послойного анализа, выполненного по моделям с гладкой и периодически наноструктурированной поверхностью, а также многослойной мишени со стохастическим поверхностным слоем. Получено, что модель гладкого слоя дает более точные результаты расчета толщин при описании стохастической поверхности с относительной погрешностью до 50%.

Для решения обратной задачи по восстановлению послойного химического фазового профиля шероховатой пленки из экспериментального спектра разработан численный метод анализа. В основе метода заложена модель мишени со стохастическим наноструктурированным поверхностным слоем. Для корректного применения данного метода необходимо проводить исследование поверхности как минимум под тремя различными углами зондирования. Подбор параметров групп связанных пиков (энергия связи и интенсивность) проводился по алгоритму Левенберга – Маккаварда. По характерным значениям энергии связи идентифицированы химические фазы. По

значениям интенсивностей рассчитывались толщины приповерхностных плоскопараллельных слоев и параметры поверхностного наноструктурированного слоя (средняя толщина, максимальная толщина и дисперсия толщины).

По предложенному методу послойного химического фазового анализа мишеней с шероховатой поверхностью исследована окисленная тонкая пленка ниобия на кремниевой подложке. Результаты анализа, выполненного по двум моделям мишени, и рентгеновский фотоэлектронный спектр линии Nb 3d представлены на рисунке 3. Обнаружено значительное различие толщин поверхностного слоя. При сравнении средних толщин слоя Nb_2O_5 его относительная погрешность составляет $\sim 20\%$. Применение предложенного метода анализа позволяет определить не только послойный химический фазовый состав пленки, но и средние параметры наноструктур ее поверхностного слоя (среднюю толщину слоя, максимальную толщину и дисперсию толщины слоя).

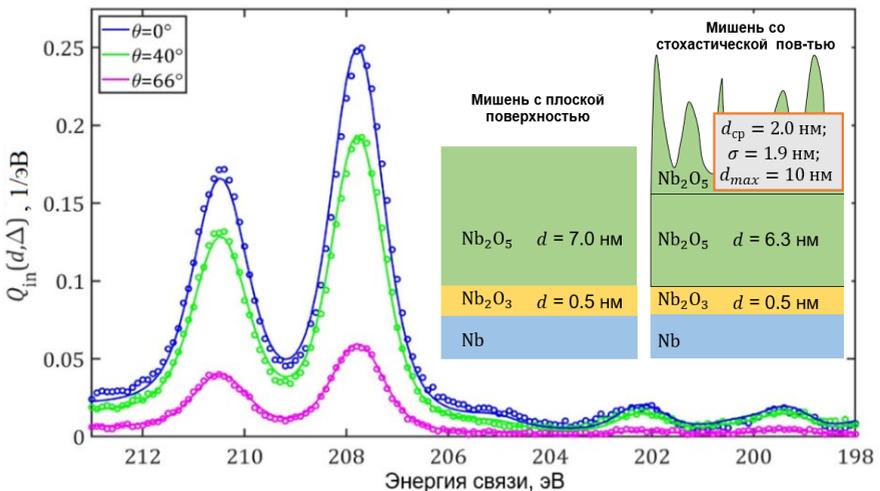


Рисунок 3. Результаты послойного химического фазового анализа, выполненного по двум моделям мишени, и рентгеновский фотоэлектронный спектр линии Nb 3d окисленной пленки ниобия при углах зондирования 0° , 40° и 66° . Кругами показаны экспериментальные данные, сплошными линиями – результаты расчета по предложенному методу анализа

Для верификации результатов анализа, полученного с помощью предлагаемого метода, окисленная пленка ниобия исследована с помощью атомно-

силовой микроскопии. Получено трехмерное АСМ-изображение поверхности пленки (рис. 4а). Рассчитана зависимость плотности вероятности проходимо-го потоком фотоэлектронов расстояния при различных углах вылета (рис. 4б). Относительная погрешность значений параметров стохастического слоя, полученных с помощью метода послойного химического фазового анализа мишеней с шероховатой поверхностью, составляет не более 3%.

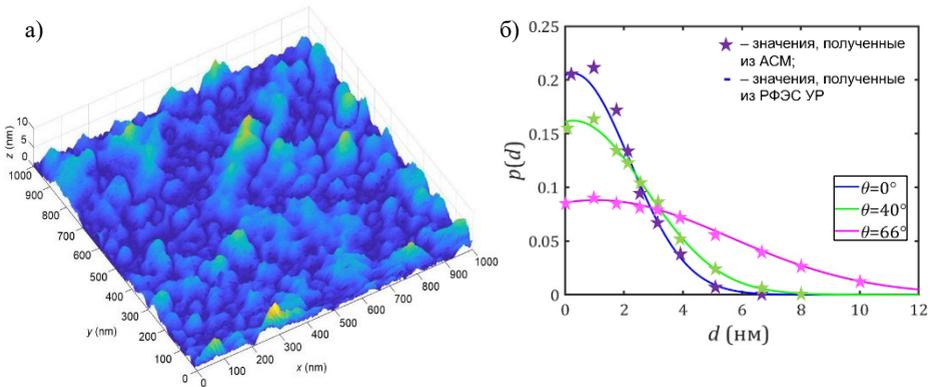


Рисунок 4. а) Трехмерное АСМ-изображение поверхности пленки, б) Плотность вероятности проходимо-го потоком фотоэлектронов расстояния при различных углах вылетах

Четвертая глава [A1, A5, A7, A8, A9] посвящена разработке метода формирования неоднородных металл-оксидных пленок с помощью многоэтапных режимов воздействия ионами аргона и атмосферного окисления при контроле их послойного химического фазового состава. Использование ионов аргона для модификации пленок обосновывается тем, что в результате воздействия не образуются химические связи аргон-кислород и аргон-ниобий. Расчеты глубины проникновения ионов аргона вглубь мишени и коэффициентов распыления атомов пленки выполнены в программе TRIM [16]. Определены два наиболее предпочтительных режима облучения, которые приводят к «послойной» модификации пленки и сглаживанию ее шероховатости: модифицирование (флюенс – $1,3 \cdot 10^{15}$ ион/см², $\gamma = 70^\circ$; $E_{ion} = 0.5$ кэВ; отношение коэффициентов распыления кислорода и ниобия $Y_O/Y_{Nb} \approx 3.3/0.4$; глубина проникновения ионов аргона $R_{Ar} \approx 1.5$ нм; $I_{ion} = 0.5$ мкА) и распыление (флюенс – $5 \cdot 10^{15}$ ион/см², $\gamma = 70^\circ$; $E_{ion} = 1.0$ кэВ;

$Y_{O}/Y_{Nb} = 5.4/0.8$; $R_{Ar} \approx 2.0$ нм; $I_{ion} = 1.0$ мкА).

Модифицирование приводит к кислородному обеднению оксидных слоев без существенного изменения их толщин за счет более интенсивного распыления атомов кислорода. Уменьшение интенсивности селективного распыления во втором режиме позволяет эффективно изменять толщину слоя. Обнаружено, что присутствие углеродного слоя на поверхности препятствует распылению атомов мишени.

Комбинирование режимов воздействия (распыление, модифицирование и окисление) позволяет сформировать многокомпонентную наноструктурированную пленку. Этапы изготовления окисленных ниобиевых тонких пленок и некоторая последовательность режимов воздействия, которая наглядно демонстрирует эффекты модификации поверхности, представлены на рисунке 5. После каждого этапа модификации по разработанному методу анализа неоднородных пленок определялся послойный химический фазовый состав и делались дальнейшие выводы о длительности следующего воздействия. Тем самым достигался *in situ* эффект контролируемого формирования субоксидных слоев.

Динамика результатов послойного химического фазового анализа окисленной пленки ниобия при формировании чередующихся субоксидных слоев с различной степенью окисления металла (последовательность II из рис. 5) представлена на рисунке 6. Распыление (этап 2, рис. 6) приводит не только к уменьшению толщины пентаоксидного слоя, но и формированию неоднородного многофазного поверхностного субоксидного слоя. Модифицирование (этап 3) позволило изменить химический состав поверхностного слоя и увеличить его толщину. Кратковременная экспозиция на атмосфере (этап 4) приводит к частичному окислению поверхностного слоя до фазы Nb_2O_5 . Второе модифицирование (этап 5) создает поверхностный слой с малой степенью окисления ниобия и изменяет химический состав приповерхностного слоя. Таким образом, подбирая режимы воздействия, их очередность и длительность можно сформировать сложную неоднородную многослойную металл-оксидную пленку, в которой градиент степени окисления слоев по глубине меняет знак.



Рисунок 5. Этапы изготовления окисленных ниобиевых тонких пленок и последовательность режимов воздействия

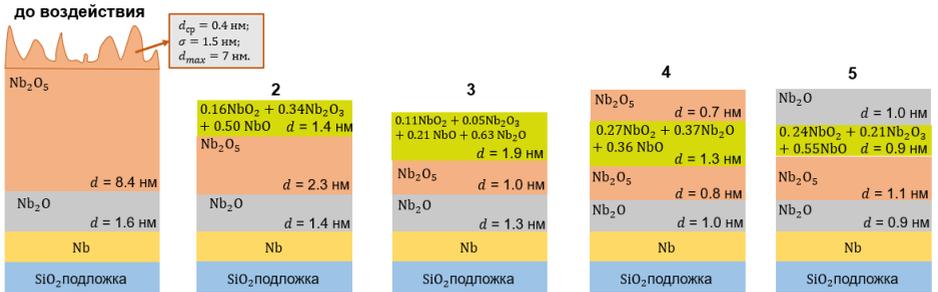


Рисунок 6. Послойный фазовый состав пленки ниобия после: 2 – распыления (30 мин.); 3 – модифицирования (15 мин.); 4 – окисления (1 мин.); 5 – модифицирования (15 мин.)

В заключении сформулированы основные результаты и выводы, полученные в данной работе:

1. Предложена модификация алгоритма послойного химического фазового анализа окисленных ниобиевых пленок, основанного на модели плоскопараллельных слоев мишени, с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Алгоритм позволяет определить послойный химический фазовый состав металл-оксидных ультратонких пленок с субнанометровым разрешением. Показано, что для получения наиболее точных результатов анализа образцы необходимо исследовать как минимум под тремя различными углами зондирования.

2. Получено аналитическое выражение для расчета функции фотоэлектронной эмиссии от мишени с периодическими наноструктурами на поверхности с учетом эффекта затенения поверхности в приближении «прямо-вперед». Разработан численный метод расчета функции фотоэлектронной эмиссии от слоисто-неоднородной мишени со стохастической наноструктурированной поверхностью. Полученные аналитические выражения для фотоэлектронной эмиссии от мишеней с периодическими и стохастическими поверхностными неоднородностями позволяют рассчитывать рентгеновские фотоэлектронный спектры в широком диапазоне потерь энергии для различных углов визирования.

3. Создан метод определения послойного химического фазового состава неоднородных пленок с наноразмерной шероховатой поверхностью на основе рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Метод основан на модели многослойной мишени со стохастическим поверхностным слоем. Метод позволяет определить послойный фазовый профиль пленки и средние размерные параметры ее поверхностного наноструктурированного слоя. Результаты анализа пленки, полученного по предлагаемому методу, были верифицированы с помощью атомно-силовой микроскопии.

4. Выделены и оптимизированы два основных режима ионного облучения поверхности пленки: модифицирование и распыление. Режим модифицирования (флюенс – менее $1,3 \cdot 10^{15}$ ион/см², начальная энергия ионов – 0,5 кэВ, угол падения ионов от нормали к поверхности – 70°) приводит к кислородному обеднению оксидных слоев без существенного изменения его толщины за счет более интенсивного распыления атомов кислорода мишени. Режим распыления (флюенс – $5 \cdot 10^{15}$ ион/см², начальная энергия ионов – 1,0 кэВ, угол падения ионов от нормали к поверхности – 70°) приводит не только к модифицированию поверхности, но и позволяет эффективно изменять толщину слоя.

5. Предложен метод контролируемого формирования наноструктурированных металл-оксидных пленок, который основан на чередовании различных режимов модифицирования, распыления и кратковременного окисления и позволяет создавать неоднородные многослойные пленки с известным химическим составом по глубине.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В рецензируемых журналах, индексируемых Scopus/WoS/RSCI:

- A1. **Лукьянцев Д.С.**, Лубенченко А.В., Иванов Д.А., Лубенченко О.И. Модификация и распыление неоднородных многослойных окисленных металлических пленок слаботочными пучками ионов аргона // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2024. – № 5. – С. 69-77. DOI: 10.31857/S1028096024050106, авт.вклад 0.9 п.л. из 1.11 п.л. (РИНЦ: ИФ – 0.303).
- A2. Лубенченко А.В., Лубенченко О.И., Иванов Д.А., **Лукьянцев Д.С.**, Паволоцкий А.Б., Павлов О.Н., Иванова И.В. Послойный анализ многослойных неоднородных ультратонких пленок с субнанометровым разрешением // Журнал технической физики. – 2024. – Т. 94, № 8. – С. 1229-1239, авт.вклад 0.65 п.л. из 1.11 п.л. (РИНЦ: ИФ – 0.717). [Lubenchenko A.V., Lubenchenko O.I., Ivanov D.A., **Lukyantsev D.S.**, Pavolot-sky A.B., Pavlov O.N., Ivanova I.V. Depth profiling of multilayer inhomogeneous ultra-thin films with a sub-nanometer resolution // Technical Physics. – 2024. – Vol. 69, № 8. – P. 1137-1147. DOI: 10.61011/TP.2024.08.59000.112-24, авт.вклад 0.65 п.л. из 1.11 п.л. (WoS: JIF – 1.1)].
- A3. **Лукьянцев Д.С.**, Лубенченко А.В., Иванов Д.А., Будаев В.П., Павлов И.Н., Павлов О.Н. Численное моделирование фотоэлектронной эмиссии от наноструктурированной поверхности // Ядерная физика и инжиниринг. – 2024. – Т. 15, № 4. – С. 400-408, авт.вклад 0.8 п.л. из 0.94 п.л. (РИНЦ: ИФ – 0.056). [**Lukiantsev D.S.**, Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., Budaev V.P., Pavlov I.N., Pavlov O.N., Lubenchenko O.I. Numerical Simulation of Photoelectric Emission from a Nano-structured Surface // Physics of Atomic Nuclei. – 2023. – Vol. 86, № 10. – P. 2344-2351. DOI: 10.1134/S1063778823100290, авт.вклад 0.8 п.л. из 0.94 п.л. (WoS: JIF – 0.3)].
- A4. **Лукьянцев Д.С.**, Лубенченко А.В., Иванов Д.А., Лубенченко О.И., Федотов А.С. Влияние наноразмерных горизонтальных неоднородностей на послойный анализ поверхности методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2022. – Т. 22, № 6. – С. 1104-1111, авт.вклад 0.85 п.л. из 0.94 п.л. (РИНЦ: ИФ – 0.588). [**Lukyantsev D.S.**, Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., Lubenchenko O.I., Fedotov A.S. Influence of nano-sized

horizontal inhomogeneities on surface profiling by means of XPS // *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*. – 2022. – Vol. 22, № 6. – P. 1104-1111. DOI: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1104-1111, авт.вклад 0.85 п.л. из 0.94 п.л. (Scopus: SJR – 0.151)].

A5. Лубенченко А.В., Иванов Д.С., Лубенченко О.И., Паволоцкий А.Б., **Лукьянцев Д.С.**, Ячук В.А., Павлов О.Н. Формирование неоднородных оксидных и субоксидных слоев на ультратонкой металлической пленке при многократном окислении и ионном распылении // *Журнал технической физики*. – 2022. – Т. 92, № 8. – С. 1172-1178, авт.вклад 0.45 п.л. из 0.81 п.л. (РИНЦ: ИФ – 0.717). [Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., Lubenchenko O. I., Pavolotsky A.B., **Lukiantsev D.S.**, Iachuk V.A., Pavlov O.N. Formation of inhomogeneous oxide and suboxide layers on an ultra-thin metal film by multiple oxidation and ion sputtering // *Technical Physics*. – 2022. – Vol. 67, № 8. – P. 990-995. DOI: 10.21883/TP.2022.08.54561.68-22, авт.вклад 0.45 п.л. из 0.81 п.л. (WoS: JIF – 1.1)].

В сборниках конференций, индексируемых Scopus:

A6. Lubenchenko A.V., Lubenchenko O.I., Ivanov D.A., **Lukyantsev D.S.**, Ivanova I.V. Website XPS.mpei.ru: a Tool for XPS Analysis of Solid Surface // 2024 7th International Conference on Information Technologies in Engineering Education (Inforino). – IEEE, 2024. – P.1-4., DOI: 10.1109/Inforino60363.2024.10552030, авт.вклад 0.2 п.л. из 0.5 п.л.

A7. Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., **Lukiantsev D.S.**, Smirnov M.B., Pavlov O.N. Investigation of the effect of multiple oxidation and ion sputtering on the formation of inhomogeneous oxide layers on the surface of an ultrathin metal film // 2023 5th International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (REEPE). – IEEE, 2023. – P.1-5. DOI: 10.1109/REEPE57272.2023.10086730, авт.вклад 0.25 п.л. из 0.56 п.л.

A8. **Lukiantsev D.S.**, Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., Lubenchenko O.I., Pavolotsky A.B., Iachuk V.A., Pavlov O.N. The Formation of nanosuboxide layers in the oxide of niobium in low-power ion beam of argon // 2021 3rd International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (REEPE). – IEEE, 2021. – P. 1-4. DOI: 10.1109/REEPE51337.2021.9388002, авт.вклад 0.45 п.л. из 0.56 п.л.

A9. Lubenchenko A.V., **Lukyantsev D.S.**, Pavolotsky A.B., Ivanov D.A., Lubenchenko O.I., Ivanova I.V., Iachuk V.A., Pavlov O.N. Controlled Ultra-Thin Suboxide Films

Generation in Metal-Oxide Systems by Ar+Ion Irradiation // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2020. – Vol. 1695. – P. 012025. DOI: 10.1088/1742-6596/1695/1/012025, авт.вклад 0.3 п.л. из 0.42 п.л.

A10. Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., **Lukiantsev D.S.** Application of MatLab for Processing X-ray Photoelectron Spectroscopy Spectra // 2020 V International Conference on Information Technologies in Engineering Education (Inforino). – IEEE, 2020. – P. 1-4. DOI: 10.1109/Inforino48376.2020.9111800, авт.вклад 0.4 п.л. из 0.5 п.л.

A11. Lubenchenko A.V., Lubenchenko O.I., Ivanov D.A., Ivanova I.V., Iachuk V.A., **Lukiantsev D.S.** Acceleration of Monte Carlo Simulation of Electron Transport // 2020 V International Conference on Information Technologies in Engineering Education (Inforino). – IEEE, 2020. – P. 1-4. DOI: 10.1109/Inforino48376.2020.9111861, авт.вклад 0.15 п.л. из 0.5 п.л.

A12. Lubenchenko A.V., Iachuk V.A., Lubenchenko O.I., Ivanov D.A., **Lukiantsev D.S.**, Lashkov I.A. XPS Study of Air-Oxidized Chrome Thin Films // 2020 International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (REEPE). – IEEE, 2020. – P. 1-4. DOI: 10.1109/REEPE49198.2020.9059145, авт.вклад 0.15 п.л. из 0.5 п.л.

A13. Lubenchenko A.V., Ivanov D.A., Lubenchenko O.I., Yachuk V.A., Pavlov O.N., Lashkov I.A., **Lukyantsev D.S.** Non-destructive chemical and phase layer profiling of multicomponent multilayer thin ultrathin films // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2019. – Vol. 1370. – P. 012048. DOI: 10.1088/1742-6596/1370/1/012048, авт.вклад 0.25 п.л. из 0.56 п.л.

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ:

A14. Лубенченко А.В., Иванов Д.А., Лубенченко О.И., Иванова И.В., **Лукьянцев Д.С.** Программа для моделирования фотоэлектронной эмиссии от мишени с горизонтальными периодическими неоднородностями нанометрового масштаба на ее поверхности. Заявка № 2023682803. Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 31.10.2023.

A15. Лубенченко А.В., Иванов Д.А., Лубенченко О.И., Иванова И.В., **Лукьянцев Д.С.** Программа для моделирования фотоэлектронной эмиссии от мишени со

стохастическими неоднородностями на ее поверхности. Заявка № 2023682764. Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 31.10.2023.

Список цитируемой литературы:

1. XPS Study of Niobium and Niobium-Nitride Nanofilms/A.V. Lubenchenko, A.A. Batrakov, I.V. Shurkaeva [et al.] // Surf. Interf. Anal. – 2018. – Vol. 12, № 4. – P. 692-700.
2. Proctor, A. Data analysis techniques in x-ray photoelectron spectroscopy / A. Proctor, P. M. A. Sherwood // Anal. Chem. – 1982. – Vol. 54, № 1. – P. 13-19.
3. Tougaard, S. Energy loss in XPS: Fundamental processes and applications for quantification, non-destructive depth profiling and 3D imaging / S. Tougaard // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. – 2010. – Vol. 178-179. – P. 128-153.
4. XPS study of multilayer multicomponent films / A. V. Lubenchenko, A. A. Batrakov, A. B. Pavolotsky [et al.] // Appl. Surf. Sci. – 2018. – Vol. 427. – P. 711-721.
5. Chen, Y. F. Surface effects on angular distributions in X-ray-photoelectron spectroscopy / Y. F. Chen // Surf. Sc. – 2002. – Vol. 519, № 1. – P. 115-124.
6. Influence of the direction of motion on the inelastic interaction between electrons and solid surfaces / Y.C.Li, Y.H.Tu [et al.]// Surf. Sc.–2005.–Vol.589, №1. –P.67-76.
7. Doniach, S. Many-electron singularity in X-ray photoemission and X-ray line spectra from metals / S. Doniach, M. Sunjic // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1970. – Vol. 3, № 2. – P. 285-291.
8. Crist, B. V. Handbooks of Monochromatic XPS Spectra: The Elements and Native Oxides / B. V. Crist. – Wiley New York, 2000. – 519 с.
9. NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database. NIST Standard Reference Database 20. / A. V. Naumkin, A. Kraut-Vass, S. W. Gaarenstroom, C. J. Powell. – 2012.
10. Ambient Temperature Growth of Mono-and Polycrystalline NbN Nanofilms and Their Surface and Composition Analysis / S. Krause, V. Afanas Ev, V. Desmaris [et al.]// IEEE Trans. on Appl. Supercond. – 2016. – Vol. 26, № 3. – P. 1-5.
11. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation / A.Jain, S.P.Ong, G.Hautier [et al.]// APL Mat. – 2013. – Vol. 1, № 1. – P. 011002.

12. Tougaard, S. Deconvolution of loss features from electron spectra / S. Tougaard // Surf. Sci. – 1984. – Vol. 139, № 1. – P. 208-218.
13. Effect of nanocoating morphology on the signal of X-ray Photoelectron Spectroscopy / V. P. Afanas'ev, L. G. Lobanova, D. N. Selyakov, M. A. Semenov-Shefov // J. Phys.: Conference Series. – 2021. – Vol. 2144, № 1. – P. 012007.
14. Tanuma, S. Calculation of electron inelastic mean free paths (IMFPs) VII. Reliability of the TPP-2M IMFP predictive equation / S. Tanuma, C. J. Powell, D. R. Penn // Surf. Interface Anal. – 2003. – Vol. 35, № 3. – P. 268-275.
15. Jablonski, A. Practical expressions for the mean escape depth, the information depth, and the effective attenuation length in AES and XPS / A. Jablonski, C. J. Powell // J. Vac. Sci. Technol., A. – 2009. – Vol. 27. – № 2. – P. 253-261.
16. Biersack, J. P. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets / J. P. Biersack, L. G. Haggmark // Nucl. Instrum. Methods. – 1980. – Vol. 174, № 1. – P. 257-269