

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ТВЁРДОГО ТЕЛА ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

А.В.Сугоняко<sup>1)</sup>, В.А.Жихарев<sup>1,2)</sup>, А.А.Бухараев<sup>1)</sup>, Н.И.Нургаизов<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН

420029, Казань, Сибирский тракт, 10/7, тел: 8432-760563, факс: 8432-765075,

e-mail: bukh@dionis.kfti.knc.ru

<sup>2)</sup> Казанский государственный технологический университет, 420015, Казань, К.Маркса, 68

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования процесса имплантации ускоренных ионов в твёрдое тело. При проведении расчетов учитывалось накопление с ростом дозы облучения радиационных дефектов Френкеля и их взаимная рекомбинация, что приводит к насыщению числа вакансий при увеличении дозы облучения. Кроме того, было показано, что рекомбинация дефектов оказывает значительное влияние на соотношение двух конкурирующих процессов - распыления и распухания облучаемого образца. Результаты численного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными по радиационно-индуцированному растворению, распуханию и распылению, полученными при исследовании поверхности имплантированного диоксида кремния с помощью атомно-силового микроскопа.

## Введение

Взаимодействие потока ускоренных ионов с твердым телом исследуется уже достаточно долгое время, и, хотя существует большое количество теоретических и экспериментальных работ, посвящённых данной теме, ряд важных вопросов до сих пор остаётся без ответа. В настоящей работе затрагивается проблема динамики дефектной структуры стеклообразного вещества в процессе облучения. Интерес к этой проблеме вызван экспериментами по определению скорости травления облучённого  $\text{SiO}_2$  в растворе плавиковой кислоты [2,3]. Хорошо известен тот факт, что скорость травления в облучённом слое образца выше скорости травления необлучённого слоя; причём во многих случаях при увеличении дозы облучения изменение скорости травления имеет тенденцию к насыщению. Одна из возможных причин возрастания скорости травления в облучённом образце заключается в её зависимости от количества дефектов структуры, образованных в процессе облучения. Таким образом, представляет интерес получение информации о распределении концентрации образовавшихся дефектов по глубине облучённого слоя. В настоящее время существуют различные компьютерные программы, моделирующие процесс имплантации ускоренных ионов в вещество [4,5], но акцент в них делается на расчёте конечного распределения внедрённых ионов. В данной работе проведено компьютерное моделирование имплантации с учетом образования, накопления и рекомбинации радиационных дефектов в матрице.

Как известно, изменение структуры твёрдого тела при облучении обусловлено несколькими различными процессами. Первый из них – смещение атомов и образование точечных дефектов в ходе развития каскада атомных столкновений. Дальнейшие структурные изменения связаны с процессами релаксации и диффузии точечных дефектов.

Описываемая компьютерная программа осуществляет расчёт распределения по глубине внедряемых ионов, вакансий, образующихся после выбивания атомов исходной мишени. Кроме того, учитывается эволюция состава мишени с ростом дозы облучения и эффект рекомбинации образующихся вакансий и межузельных атомов.

## 1. Описание алгоритма программы

Разработанный нами алгоритм программы отражает процесс внедрения ускоренной частицы в мишень и развитие каскада атомных столкновений. При моделировании атомных столкновений в данной математической модели было использовано приближение парных столкновений в аморфном теле, которое лежит в основе широко известных программ SRIM [4] и DYNA [5]. Как и в упомянутых программах, в нашей модели облучаемая мишень условно делилась по глубине на небольшие (порядка нанометра) слои. При определённом значении дозы облучения концентрации компонент мишени в каждом слое считались постоянными по всему объёму слоя. Нужная доза облучения разбивалась на некоторое количество шагов, после каждого из которых, как и в программе DYNA, происходил перерасчёт концентраций компонент мишени.

Но в отличие от моделей расчётов, рассматривающих лишь этап развития каскадов столкновений, нами была принята во внимание и часть последующего этапа релаксации, связанная с рекомбинацией образовавшихся дефектов. Рекомбинация описывалась простейшими кинетическими уравнениями, содержащими член:

$$\alpha_R N_{VAC} N_{INT}$$

где  $N_{VAC}$  - число вакансий в слое,  $N_{INT}$  - число межузельных атомов,  $\alpha_R$  - эффективный безразмерный коэффициент рекомбинации.

Расчет рекомбинации происходил после каждого шага по дозе.

Изменение структуры облучаемой мишени в данной программе моделировалось исходя из следующих, принятых нами, предположений: 1) на месте выбитого в процессе столкновений атома образуется пустое пространство – вакансия; 2) выбитый атом, потеряв необходимую для движения энергию, останавливается в междоузельной позиции, становясь *междоузельным атомом*. Появление междоузельных атомов и вакансий в слое в дальнейшем учитывалось путём изменения соответствующих параметров рассеяния и длин пролетов движущихся атомов.

## II. Обсуждение результатов

Используя данную модель, нам удалось получить информацию о пространственном распределении радиационных дефектов внутри облученного образца. При этом учет рекомбинации приводит к четко прослеживаемой тенденции к насыщению числа вакансий с ростом дозы облучения. Эта тенденция хорошо согласуется с экспериментальным фактом, который состоит в том, что скорость травления облученного образца в определённый момент перестает расти при дальнейшем увеличении дозы облучения [2, 3]. Доза, после которой происходит насыщение, зависит от параметров рекомбинации (коэффициента рекомбинации  $\alpha_R$ ). На рис.1 представлено распределение концентрации вакансий при моделировании процесса облучения диоксида кремния ионами фосфора с энергией 40кэВ при  $\alpha_R = 10^{-3}$ .

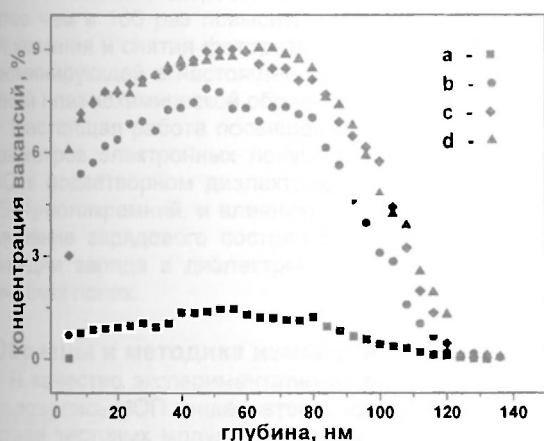


Рис. 1. Значения концентраций вакансий, образованных при имплантации ионов фосфора с энергией 40кэВ в диоксид кремния. а – доза  $10^{12}$  ион/см<sup>2</sup>; б – доза  $10^{14}$  ион/см<sup>2</sup>; в – доза  $3 \times 10^{14}$  ион/см<sup>2</sup>; г – доза  $10^{15}$  ион/см<sup>2</sup>.

На графике видно, что после достижения дозы облучения, равной  $3 \times 10^{14}$  ион/см<sup>2</sup>, концентрация вакансий перестаёт сколько-нибудь заметно изменяться – эта доза соответствует насыщению.

Следующий эффект, который нам удалось получить, связан с хорошо известными явлениями распыления и набухания мишени.

Известно, что в зависимости от материала мишени и типа падающего иона, для одних ионов превалирует распыление поверхности мишени, и толщина образца после облучения уменьшается, а при облучении ионами другого типа происходит заметное увеличение толщины мишени.

Так, эксперимент по бомбардировке поверхности диоксида кремния ионами аргона с энергией 40 кэВ и при дозе  $10^{16}$  ион/см<sup>2</sup> показал набухание мишени на величину 1,8 нм, тогда как при облучении ионами углерода при аналогичных условиях толщина мишени уменьшилась на 2 нм.

В нашей программе величина распыления поверхности определяется коэффициентом распыления  $S$ , который определяет количество атомов мишени, выбиваемое каждым падающим ионом. Величина набухания образца зависит от степени разрыхления материала мишени, которая в свою очередь, зависит от количества вакансий в слое, т.е. от того, насколько эффективна рекомбинация. Таким образом, при моделировании процесса облучения изменение уровня поверхности обуславливается двумя параметрами: коэффициентом распыления и коэффициентом рекомбинации. Анализ результатов вычислений показал довольно сильную зависимость соотношения распыления и набухания от коэффициента рекомбинации, тогда как варьируемый в разумных пределах коэффициент распыления вносит заметно меньший вклад в это соотношение. Кроме того, наблюдается достаточно узкая область значений

$\alpha_R$ , в пределах которой при одном и том же коэффициенте распыления  $S$  можно получить как распыление, так и набухание. Это указывает на существование некоей критической величины  $\alpha_R$  для конкретной системы ион – мишень. Чтобы пояснить физический смысл этих рассуждений, вернёмся к экспериментам по имплантации аргона и углерода. Из-за чрезвычайно низкой растворимости инертных газов аргон, попадая в вакансионных пустотах [1], за счёт чего уменьшается число свободных вакансий, принимающих участие в рекомбинации. Для того чтобы учесть эту ситуацию в рамках нашей модели нам достаточно уменьшить число рекомбинирующих вакансий, то есть эффективно уменьшить коэффициент рекомбинации. Действительно, при расчетах распыления и набухания наилучшее согласие с экспериментом достигалось тогда, когда  $\alpha_R$  для углерода была значительно больше, чем  $\alpha_R$  при расчете облучения аргоном.

## Заключение

Таким образом сравнение результатов эксперимента и численного моделирования имплантации показало, что предложенный алгоритм, учитывающий процессы рекомбинации, позволяет объяснить эффект насыщения скорости травления с ростом дозы облучения.

Также показано, что эффективный коэффициент рекомбинации радикальным образом влияет на соотношение распыления и распухания, что позволяет объяснить существенное различие этих процессов при имплантации ионов различного типа.

Работа выполнена при поддержке Министерства промышленности, науки и технологий РФ в рамках программы "Перспективные технологии и устройства микро- и нанозлектроники" и Научно-образовательного центра КГУ (REC 007).

### Список литературы

1. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. – М.: Мир, 1971.
2. Валиев К.А., Данилов В.А., Дракин К.А., Пешехонов С.В., Раков А.В. // Микроэлектроника, 1982. – Т. 11. – № 4. – С. 323-328.
3. Бухараев А. А., Нургазизов Н. И., Можанова А. А., Овчинников Д. В. // Микроэлектроника, 1999. – Т. 28. – № 5. – С. 385-394.
4. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark The Stopping and Ranges of Ions in Matter // New York: Pergamon Press. 1985.
5. Коноплев В.М. // Поверхность. 1987. – № 2. – С. 68-73.

## COMPUTER SIMULATION OF DAMAGE DISTRIBUTION IN ION IMPLANTED SOLID STATE

A.V.Sugonyako<sup>1)</sup>, V.A.Zhikharev<sup>1,2)</sup>, A.A.Bukharaev<sup>1)</sup>, N.I.Nurgazizov<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> Kazan Physical Technical Institute of Russian Academy of Sciences,  
Sibirsky Trakt, 10/7 Kazan, 420029, Russia buk@ionis.kfti.knc.ru

<sup>2)</sup> Kazan State Technology University, K.Marx, 68, Kazan, 420015, Russia

The model for computer simulation of the depth distribution of radiation induced damage is presented. The simulation also involves recombination processes, which are describing by simple kinetic equations. Thereby, some important experimental facts were explained. It is known that in some materials etching rate in irradiated surface layer has reached maximum and saturation with radiation dose increase. One reason for this fact is a dependence of the etching rate on the amount of radiation induced damage in the implanted layer. The dose dependence of the induced vacancy distribution calculated with the model is in agreement with etching experiment results. Also we have simulated target sputtering and swelling in the process of ion implantation for different kinds of ions.