

The vibrational modes of the I₂O defect have been also analyzed. Calculations of the vibrational spectra of the structures were performed in the cluster approximation (DFT, B3LYP, 6-31G). The normal vibrations of the oxygen atom and the nearby silicon atoms have been calculated. An infra-red absorption active mode related to vibrations of the oxygen atom for the configuration is found to be at 971 cm⁻¹.

The results presented in this work have shed some new light on the electronic and dynamic properties of the silicon di-interstitial and its interactions with other lattice defects. It is found that the neutral I₂ defect can migrate in silicon at (or slightly above) room temperature, so the theoretical predictions of high mobility of I₂ [4, 5] are confirmed. The mobile I₂ centers can interact with other lattice defects and impurities. The data on the structure, electronic and dynamic properties of the I₂O complex are presented. It can be suggested that similar to the Si self-interstitial, the I₂ defect can also interact with carbon and boron impurities in Si crystals.

REFERENCES

1. Pelaz L. B diffusion and clustering in ion implanted Si: The role of B cluster precursors / L. Pelaz [et al.] // Appl. Phys. Lett. 1997. Vol. 70. P. 2285–2287.
2. Cowern N.E.B., Energetics of self-interstitial clusters in Si / N.E.B. Cowern [et al.] // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 82. P. 4460–4463.
3. Libertino S. Formation, evolution and annihilation of interstitial clusters in ion-implanted silicon / S. Libertino, S. Coffa, and J.L. Benton // Phys. Rev. B 2001. Vol. 63. 195206 (1–14).
4. Kim J. Thermally activated reorientation of di-interstitial defects in silicon / J. Kim [et al.] // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. P. 1990–1993.
5. Du Y.A. Diffusion mechanisms for silicon di-interstitial / Y.A. Du, R.G. Hennig, and J.W. Wilkins // Phys. Rev. B 2006. Vol. 73. 245203-(1-5).
6. Lopez G.M. Structure, energetic, and extrinsic levels of small self-interstitial clusters in silicon / G.M. Lopez and V. Fiorentini // Phys. Rev. B 2004. Vol. 69. 155206-(1-8).
7. Hermansson J. Complexes of the self-interstitial with oxygen in irradiated silicon: a new assignment of the 936 cm⁻¹ band / J. Hermansson [et al.] // Physica B 2001. Vol. 302-303 P. 188–192.
8. Khirunenko L.I. Self-interstitial-oxygen related defects in low-temperature irradiated Si / L.I. Khirunenko [et al.] // Physica B 2001. Vol. 308-310 P. 458–461.
9. Davies G. Radiation damage in silicon exposed to high-energy protons / G. Davies [et al.] // Phys. Rev. B 2006. Vol. 73. 165202-(1–10).
10. Gusakov Vasilii. A New Approach for Calculating the Band Gap of Semiconductors within the Density Functional Method / Gusakov Vasilii // Solid State Phenomena. 2016. Vol. 242. P. 434–439.

РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В. И. Белько¹, В. Е. Гусаков², Н. Н. Дорожкин¹

*Белорусский государственный университет, belko@bsu.by
ГНПО Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению*

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование каскадов атомных смещений в кремниевых нанопроволоках. Показано, что с уменьшением размеров нанопровода количество первичных радиационных дефектов уменьшается, а зависимость числа сформировавшихся вакансий носит немонотонный характер от энергии первично выбитого атома.

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное материаловедение (количественный анализ физических процессов в наноразмерных элементах интегральных схем; моделирование технологических процессов производства наноразмерных ИС) становится важной составляющей частью современной индустрии. Это обусловлено тем, что традиционные методы численного моделирования, которые используются для макроскопических объектов, не могут быть непосредственно применены при моделировании наноразмерных устройств. Повышение радиационной стойкости аппаратуры требует детального анализа особенностей процессов радиационного дефектообразования в наноразмерных элементах ИС и датчиков.

В данной работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование каскадов атомных смещений в кремниевых нанопроволоках. Для расчетов использовался пакет молекулярной динамики XMD [1].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассматривался образец модельного кристалла кремния в виде прямоугольного параллелепипеда, вытянутого в направлении оси z . Задавая периодические граничные условия в направлении z и свободные поверхности в направлениях x , y , получим модель нанопровода с прямоугольным сечением. В работе рассматривались два случая: кремниевый нанопровод и композиционный кремниевый нанопровод, одна из граней которого (параллельная плоскости yOz) покрыта четырьмя монослоями золота (рисунок 1). В обоих случаях модельный кристалл предварительно был приведен в равновесие при заданной температуре (в данной работе – 300 К) в течение достаточно длительного времени.

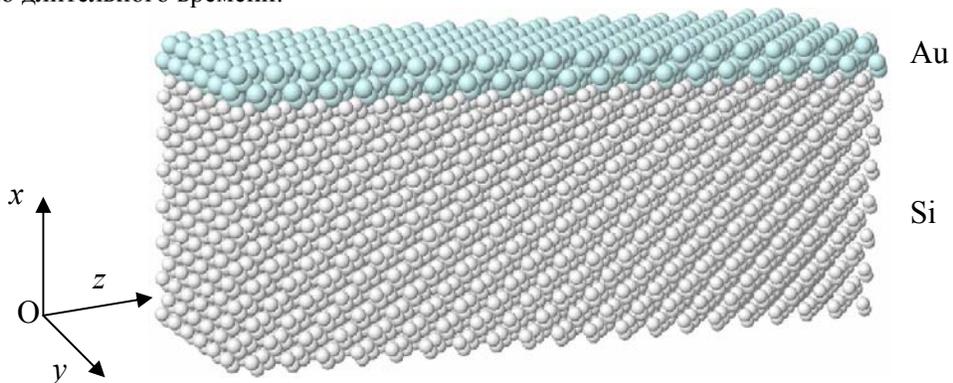


Рисунок 1. – Расчетная область для моделирования каскадов атомных смещений в композиционном кремниевом нанопроводе

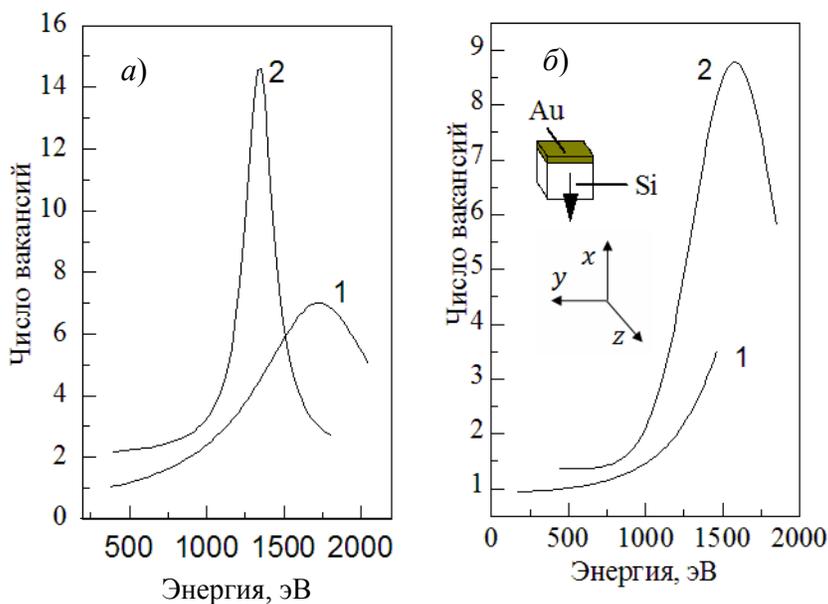
В первом численном эксперименте рассматривались образцы с размерами поперечного сечения $3,8 \times 3,26$ нм и $5,41 \times 4,89$ нм с $Fd3m$ симметрией решетки. (Соответствующие размеры расчетной области $7 \times 6 \times 20$ и $10 \times 9 \times 20$ элементарных ячеек, постоянная элементарной ячейки – 0,431 нм). Далее одному из атомов вблизи центра расчетной области образца сообщалась некоторая скорость (имитация первично выбитого атома). Начальное значение кинетической энергии ПВА менялось от 30 эВ до 1900 эВ или от 30 эВ до 3300 эВ в большем и меньшем образцах, соответственно. Для каждой начальной скорости создавались первично выбитые атомы в 5 различ-

ных случайных направлениях, которые близки к следующим векторам в стандартной системе координат: (0, -1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (0, 1, 1), (2, 0, 1).

После образования каскада атомных смещений система поддерживалась при температуре 300 К и релаксировала к равновесному состоянию в течение 5 нс. Затем выполнялся анализ образовавшихся собственных дефектов во внутренней области образца (отступая от свободных поверхностей на длину 0.5 элементарной ячейки).

Во втором эксперименте рассматривались образцы с размерами поперечного сечения 4,4x3,6 нм и 8,5x6,2 нм (расчетные области 8x6x20 и 15x12x20 элементарных ячеек) с $Fd\bar{3}m$ симметрией решетки. При этом одна из граней каждого образца, параллельная плоскости yOz , была покрыта четырьмя монослоями золота. (В связи с ограничениями, имеющимися в пакете XMD, взаимодействие атомов металла и атомов кремния описывалось тем же эмпирическим межатомным потенциалом, что и в сплошном кремнии.) Начальное значение энергии первично выбитого атома менялось от 30 эВ до 1900 эВ в обоих образцах. Для каждой начальной скорости создавались ПВА в 3 различных направлениях: вдоль оси z , вдоль оси x от металла и вдоль оси x к металлу. После образования каскада атомных смещений система также релаксировала к равновесному состоянию в течение 5 нс, а затем выполнялся анализ образовавшихся собственных дефектов во внутренней области образца, отступая от свободных поверхностей на длину 0.5 элементарной ячейки.

Статистический анализ результатов представлен на рисунке 2.



а – нанопровод кремния с размерами 1 – 7x6x20; 2 – 10x9x20;
б – композиционный нанопровод Au+Si с размерами 1 – 8x6x20; 2 – 15x12x20;
 стрелкой указано направление первично выбитого атома;

Рисунок 2. – Зависимость числа вакансий в нанопроводе от энергии первичного выбитого атома

Из полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1. С уменьшением поперечного сечения нанопровода количество первичных радиационных дефектов уменьшается.

2. Зависимость числа сформировавшихся вакансий носит немонотонный характер от энергии первично выбитого атома. Так для рассматриваемых размеров нанопроводов максимальное число вакансий наблюдается при энергии первично выбитого атома 1400 эВ, причем с уменьшением размеров образца максимум распределения смещается в сторону больших энергий.

3. Для композиционного нанопровода (Si+Au) максимум функции распределения числа образовавшихся вакансий смещается в сторону больших энергий.

4. Функция распределения числа сформировавшихся вакансий зависит от взаимной ориентации оси нанопровода и вектора скорости первично выбитого атома.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь, ГПНИ «Информатика, космос и безопасность».

ЛИТЕРАТУРА

1. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. – March, 2010. – Mode of access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>. – Date of access: 01.05.2016.

РАДИАЦИОННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА ПАРАМЕТРЫ СЧЕТНОГО ТРИГГЕРА

**Ю. В. Богатырев¹, С. Б. Ластовский¹, В. А. Чеховский², Д. А. Огородников¹,
М. С. Темирбулатов³, В. И. Эннс³**

¹*НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, bogat@iftp.bas-net.by*

²*НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета*

³*ОАО «НИИМЭ и Микрон», Москва, Россия*

Исследовано влияние гамма-излучения Co^{60} на функционирование, статические и динамические параметры счетного триггера при различных электрических режимах (ждуший режим и режим холодного резерва).

Технология «кремний на изоляторе» (КНИ), обладая рядом преимуществ (электроизоляция, повышенная плотность упаковки, уменьшение паразитных емкостей), рассматривается как альтернатива применяемым в настоящее время радиационно-стойким технологиям изготовления интегральных схем [1].

Цель данной работы – определение радиационной стойкости счетного триггера на основе КНИ-структур при различных электрических режимах (ждуший режим и режим холодного резерва) в условиях воздействия гамма-излучения Co^{60} .

Облучение образцов триггера гамма-квантами Co^{60} проводилось на установке «Исследователь» при температуре 300 К. Мощность дозы гамма-излучения составляла 15 рад/с, доза $D = 10^4 - 6 \cdot 10^6$ рад.

Объектом исследований был счетный Т триггер, входящий в тестовую структуру, разработанную ОАО «НИИМЭ и Микрон», изготовленную по субмикронной технологии КНИ 0,24 мкм [2]. На рис. 1 представлена схема классического D триггера, на базе которого был построен исследованный счетный Т триггер.