

МОДЕРНИЗАЦИЯ TRIM-АЛГОРИТМА МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

The problem questions of the ion beam masking in microelectronics are considered. Is shown, that the decision of the put task consists of two parts: a choice of optimum thickness of a protective mask and control arising at the subsequent.

Метод Монте-Карло (МК) является одним из основных при расчете траекторных параметров (R_p , ΔR_p , γ , β) ускоренных ионов, внедряемых в аморфные материалы [1]. Он позволяет решать задачи, связанные с ионным перемешиванием [2], расчетом физического распыления мишени ионным пучком [3], и незаменим при моделировании ионного легирования многослойных мишеней. Наиболее известной и часто применяемой на практике численной схемой реализации метода МК является TRIM-алгоритм [4, 5], который имеет ряд неоспоримых преимуществ перед другими алгоритмами реализации процедуры МК. Во-первых, для описания неупругих потерь энергии движущихся ионов положена наиболее корректная и легко реализуемая на практике модель Брандта – Китагавы [6, 7]. Во-вторых, “магическая” формула дает возможность с удовлетворительной точностью быстро рассчитать угол рассеяния в системе центра масс (СЦМ), необходимый для вычисления энергии, переданной в упругих столкновениях. В-третьих, TRIM-алгоритм позволяет достаточно просто менять физические модели, используемые для описания взаимодействия движущегося иона с атомами мишени. Вместе с тем имеются некоторые ограничения TRIM-схемы. В первую очередь следует отметить, что только универсальный потенциал ион-атомного взаимодействия используется в последних версиях программ. Некоторая возможность работы с другими потенциалами была предусмотрена только в ее ранних версиях [5]. Важным моментом, который может также повлиять на результаты вычисления траекторных параметров, является учет влияния неупругих потерь энергии на угол рассеяния [8, 9]. Данный аспект вычислений в известных версиях TRIM-программ не отражен, а имеющиеся в литературе данные весьма противоречивы.

Целью настоящей работы является разработка программного обеспечения, позволяющего использовать любой потенциал ион-атомного взаимодействия для описания упругих столкновений, а также выяснение влияния корреляционных эффектов на угол рассеяния в СЦМ.

Математическая модель и результаты расчетов

Для описания процесса взаимодействия ускоренных ионов с аморфными мишенями выбран алгоритм метода МК, реализованный в программе TREK-1 [10–12], которая не выходит за рамки бинарного приближения, но дает возможность расширить диапазон физических приближений для описания ион-атомных столкновений. Для работы программного комплекса TREK-1 с любым потенциалом ион-атомного взаимодействия необходимо отказаться от расчета угла рассеяния в СЦМ Θ_c по “магической” формуле. Основная трудность заключается в том, что необходимо выбрать достаточно быстрый алгоритм вычисления известного [13] классического интеграла рассеяния (КИР). Это связано с тем, что при моделировании методом МК ионной имплантации заряженной частицы средней массы с энергией в несколько сот электронвольт при наборе числа историй $N=10^4$ и средним чис-

лом столкновений до остановки $N^* = 10^3$ необходимо вычислить до 10^7 КИР. При работе в режиме полного расчета каскадов ион-атомных столкновений количество вычисляемых КИР увеличится на несколько порядков. Поэтому выбор метода расчета КИР для моделирования ионного легирования методом МК достаточно актуален, так как при сохранении хорошей точности расчета Θ_c необходим быстрый алгоритм вычислений. Выражение для классического интеграла рассеяния имеет вид:

$$\Theta_c = \pi - 2\beta \int_{x_0}^{\infty} f(x) dx / x^2, \quad (1)$$

где $f(x) = \left(1 - \frac{\Phi(x)}{x\epsilon} - \left(\frac{\beta}{x} \right)^2 \right)^{-1/2}$, $\beta = b/a$, $x = r/a$, b – прицельный пара-

метр, a – длина экранирования, ϵ – приведенная энергия, $\Phi(x)$ – функция экранирования. Данный интеграл берется аналитически только для некоторых форм представления потенциала. Прямое вычисление (1) в программах МК-моделирования не применялось из-за сингулярности на нижнем пределе, так как величина $x_0 = r_0/a$ определяется путем решения трансцендентного уравнения: $[f(x_0)]^2 = 0$. Для расчета мы адаптировали метод вычисления интегралов типа (1), предложенный в [14], к процедуре метода МК. Заменой переменных $x = x_0 / \cos(\pi z / 2)$ интеграл (1) приводится к виду [14]:

$$\Theta_c = \pi \left(1 - \frac{\beta \alpha(\epsilon, \beta)}{x_0} \right), \quad (2)$$

где $\alpha(\epsilon, \beta)$ дается выражением:

$$\alpha(\epsilon, \beta) = \int_0^1 \sin(\pi z / 2) f\left(\frac{x_0}{\cos(\pi z / 2)}\right) dz. \quad (3)$$

На основе приведенных формул нетрудно произвести вычисления, для чего необходимо выбрать соответствующую рассматриваемой задаче функцию экранирования $\Phi(x)$. Далее следует определить расстояние наибольшего сближения x_0 .

В качестве начального приближения брали $x_0 = \frac{1}{2\epsilon} + \left[\left(\frac{1}{2\epsilon} \right)^2 + \beta^2 \right]^{-1/2}$, что

соответствует неэкранированному кулоновскому потенциалу. Для нахождения x_0 использовали программу ZEROIN [15], в которой реализован один из лучших алгоритмов нахождения действительного нуля функции.

Рассмотренный подход реализован с помощью пакета Borland Delphi 5.5. Программа ANGLE тщательно тестировалась. В табл. 1 приведены результаты расчета x_0 из работы [14] и полученного нами алгоритма (колонка 4). Результаты расчета Θ_c по программе ANGLE для разных потенциалов ион-атомных взаимодействий совместно с данными [14] приведены в табл. 2. В последней колонке даны значения Θ_c , полученные с использованием “магической” формулы. Как следует из табл. 2, данный алгоритм дает значения Θ_c , близкие к “магической” формуле, но позволяет работать с широким кругом потенциалов ион-атомных взаимодействий. Сама подпрограмма расчета Θ_c (ANGLE) интегрирована в TREK-1.

Таблица 1

Значения расстояния наибольшего сближения x_0 , рассчитанные по данным [11] и настоящей работы для различных значений приведенной энергии ϵ и прицельного параметра b

ϵ	b	x_0 [14]	x_0
1E-3	5E-1	11,416	11,415
1E-3	2E+1	20,391	20,388
1E-1	2E-1	2,209	2,209
1E-1	8E+0	8,152	8,153
1E+1	2,5E-2	0,095	0,094
1E+1	1E+0	1,021	1,022

Таблица 2

Значения угла рассеяния θ_c , рассчитанные по программе ANGLE для ряда значений приведенной энергии и прицельного параметра

ϵ	b	$\theta_c^{\text{мал}},$ рад	$\theta_c^{\text{узн}},$ рад	$\theta_c^{\text{С-К}},$ рад	$\theta_c^{\text{мал}},$ рад
1E-3	5E+01	3,020	3,050	3,020	2,990
1E-3	2E+01	0,120	0,140	0,100	0,100
1E-1	2E-01	2,860	2,940	2,860	2,860
1E-1	8E+00	0,081	0,082	0,062	0,062
1E+1	2,5E-2	2,150	2,300	2,170	2,170
1E+1	1E+00	0,056	0,056	0,059	0,059

Разработанный в [16] критерий достаточности историй подвергнут нами проверке в связи с огромным повышением производительности ПЭВМ. Ранее [16] мы анализировали зависимости первых четырех моментов функции распределения пробегов от числа историй N . Значение N не превышало $(3-5) \times 10^4$. Теперь мы увеличили N до 10^5-10^6 . Результаты расчетов показали, что выводы [16] в основном верны. Только при моделировании пространственного распределения легких ионов ($Z_1 < 10$) средней энергии (100 кэВ $< E < 500$ кэВ) при $N < 10^5$ зависимости асимметрии $\gamma(N)$ и эксцесса $\beta(N)$ носят осциллирующий характер. При $N > 10^6$ осцилляции этих величин не превышают 1 %.

В табл. 3 приведены расчеты по программе TREK-1 траекторных параметров (R_p , ΔR_p), числа созданных радиационных дефектов N_d при имплантации ряда ионов в ПММА (полиметилметакрилат – $C_5H_8O_2$) в случае использования в качестве потенциалов ион-атомного взаимодействия универсального, Мольеровского и С-Кг. Результаты расчетов показывают, что широко рекламируемый авторами [5] универсальный потенциал не имеет каких-либо преимуществ перед С-Кг-потенциалом при моделировании имплантации ионов различных масс в легкие мишени. Как и ожидалось, для легких ионов все три потенциала дают практически одни и те же значения траекторных параметров. Для более тяжелых ионов отличие имеет место в области доминирования упругих потерь энергий (до 21 %), и с ростом энергии внедряемых частиц разница быстро уменьшается.

Вопрос о влиянии неупругих потерь энергии на угол рассеяния θ_c и соответственно на рассчитываемые потери энергии и траекторные параметры внедряемых в твердые тела ускоренных частиц [8, 9, 17] можно рассматривать следующим образом.

1. Траекторию рассеиваемой частицы следует разделить на два участка: первый – до точки максимального сближения r_0 , второй – от r_0 до ∞ .

2. На первом участке потенциал ион-атомного взаимодействия есть экранированный кулоновский $V_{\text{кул}}$. В точке r_0 потенциал меняется скачком в связи с возбуждением атома мишени за счет локальных неупругих потерь энергии (Q), которые необходимо представить явно зависящими от прицельного параметра $Q(b)$.

3. При этом необходимо уточнить два основных момента. Во-первых, задать аналитический вид $Q(b)$. На наш взгляд, наиболее правильно применить в данном случае теорию Фирсова [18] для расчета локальных неупругих потерь энергии, а не формулу Оуэна и Робинсона [19], используемую в ряде работ [20, 21]. Теория Фирсова хорошо описывает основные закономерности торможения тяжелых ионов с низкими скоростями, для которых

учет рассматриваемых корреляционных эффектов особенно важен. Формула Оуэна и Робинсона наилучшим образом описывает передачу энергии легкими ионами, для которых данные эффекты несущественны. Во-вторых, необходимо задать аналитический вид потенциала ион-атомного взаимодействия при $r > r_0$. В общем виде мы остановились на выражении $V^{возб} = \lambda V_{ZBL} + Q(b)$, где $\lambda = 1 - Q(b)/V_{ZBL}(r_0)$ [21], в котором, в отличие от оригинала, мы можем использовать любой невозбужденный потенциал в качестве исходного. Величина $Q(b)$ рассчитывалась в [21] по формуле Оуэна и Робинсона:

$$Q_e(b) = \frac{0,045 kE^{1/2}}{\pi a^2} \exp\left(-0,3 \frac{r_0}{a}\right). \quad (4)$$

Таблица 3

Значения траекторных параметров некоторых ионов, рассчитанные с использованием универсального, Мольеровского и C-Kr потенциалов

Ион	Энергия, кэВ	$[dE/dx]_d$ $[dE/dx]_t$	Универсальный			Мольера			C-Kr			γ	β	$\delta, \%$
			R_p , нм	ΔR_p , нм	N_e	R_p , нм	ΔR_p , нм	N_e	R_p , нм	ΔR_p , нм	N_e			
$^1H^+$	100	—	1191	53,6	8,8	1192	53,6	8,6	1192	53,3	8,7	-5,9	64,3	—
	200	—	2321	60,1	9,8	2321	66,4	9,8	2321	59,8	9,8	-6,5	78,1	—
	300	—	3699	84	10,7	3699	83,1	10,7	3699	93,2	10,7	-17	490,7	—
$^4He^+$	100	—	835	85,1	84,6	839	84,7	83,4	836	85,1	84,3	-2,3	13,0	—
	200	—	1293	91,7	90,9	1292	95,9	91,1	1293	92,9	91	-2,7	18,5	—
	300	—	1656	94,7	94,5	1657	95,3	93,9	1655	96	94,6	-2,8	20,1	—
$^{10}Ne^+$	50	0,84	119	29,5	313	117	28,3	317	119	29,0	315	-0,64	3,3	1,6
	100	0,46	238	48,9	485	237	47,7	491	238	48,5	488	-0,93	4,1	—
	200	0,25	471	76,4	698	471	76,5	701	471	76,9	703	-1,35	5,8	—
$^{40}Ar^+$	50	1,83	67,5	16,6	382	63,3	15,7	398	66,5	16,3	387	-0,28	2,8	6,2
	100	1,16	129,3	28,8	642	124,2	27,8	664	128,1	28,8	648	-0,44	2,9	3,9
	200	0,68	253,5	49,1	1022	249,2	48,0	1050	252,9	48,3	1033	-0,66	3,4	1,7
^{84}Kr	25	4,42	32,4	7,3	290	25,9	5,8	302	31,2	6,8	294	0,19	2,9	20
	50	3,53	53,7	12,0	531	45,1	10,1	554	51,9	11,5	539	0,14	2,8	16
	100	2,80	93,4	20,5	944	82,3	18,5	981	91,2	19,7	959	0,09	2,8	12
$^{131}Xe^+$	200	1,97	170,2	34,9	1624	157,5	33,6	1684	167,9	34,4	1650	-0,05	2,6	7,5
	25	5,51	26,4	4,5	261	20,8	3,5	282	25,6	4,2	266	0,14	2,9	21,2
	50	4,90	41,2	7,1	481	33,5	5,7	517	51,9	11,5	539	0,12	2,9	18,7
$^{70}Ga^+$	100	4,10	66,3	11,2	858	56,2	9,7	918	64,4	10,7	875	0,03	2,8	15,2
	200	3,20	111,2	18,0	1470	98,2	16,4	1566	108,4	17,3	1503	-0,07	2,8	11,7
	25	4,03	33,8	8,2	287	27,7	6,9	299	32,7	7,8	291	0,14	2,8	18
$^{115}In^+$	50	3,24	57,8	14,1	522	49,8	12,1	542	56,1	13,4	529	0,14	2,8	13,8
	100	2,38	103,5	24,5	921	93,4	22,3	954	101,3	23,6	935	0,04	2,7	9,8
	200	1,54	195,2	43,2	1573	182,8	41,1	1623	193,6	42,6	1599	-0,11	2,7	6,3
$^{122}Sb^+$	25	5,21	30,8	6,0	302	23,8	4,5	315	29,7	5,6	305	0,18	2,8	21,2
	50	4,57	48,9	9,6	558	39,3	7,7	583	47,3	9,1	566	0,17	2,9	19,6
	100	3,75	85,1	16,1	1006	68,4	13,7	1049	78,8	15,2	1023	0,16	2,9	17,6
	200	2,84	142,4	27,6	1764	125,2	24,7	1834	139,2	26,6	1796	0,07	2,8	12,0
	25	5,31	30,7	5,8	303	23,8	4,4	316	29,7	5,5	306	0,20	3,0	22,4
	50	4,68	48,7	9,3	562	38,8	7,5	586	46,2	8,7	570	0,15	2,8	20,3
	100	3,86	80,5	15,5	1015	67,1	13,0	1058	77,5	14,8	1030	0,15	2,9	16,6
	200	2,87	139,8	26,5	1783	121,6	23,5	1853	135,8	25,6	1814	0,08	2,8	13,0

Формула (4) заменена нами в расчетах выражением (5) [16]:

$$Q(b) = \frac{0,35(Z_1 + Z_2)^{5/3} \hbar v / a_0}{[1 + 0,16(Z_1 + Z_2)^{1/3} b / a_0]^5}. \quad (5)$$

4. Для расчета величины угла рассеяния использовали выражения, полученные в [21]:

$$\Theta(b) = \left[\frac{\Theta_1(\epsilon, b) + \Theta_2(\epsilon^*, b^*)}{2} \right], \quad (6)$$

$$\varepsilon^* = \varepsilon \frac{[1 - Q(b)/E_{\text{сцм}}]}{\lambda}, \quad b^* = \frac{b}{\sqrt{(1 - Q(b)/E_{\text{сцм}})}}. \quad (7)$$

Результаты вычислений траекторных параметров, проведенных по программе TREK-1 с учетом влияния локальных неупругих потерь энергии на угол рассеяния, показали слабое влияние модели локальных неупругих потерь энергии как на угол рассеяния, так и на расчетные величины R_p , ΔR_p для всех ионов (см. табл. 3), за исключением самых тяжелых, при $E < 50$ кэВ. В дальнейшем схема учета корреляционных эффектов будет совершенствоваться, и п. 4 представленной схемы будет модифицирован.

Таким образом, разработанная программа позволяет использовать практически любой потенциал для расчета угла рассеяния в системе центра масс с хорошей точностью и приемлемым быстродействием, что расширяет возможности TRIM-алгоритма для описания упругих взаимодействий.

1. Biersack J.P., Haggmark L.G. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1980. Vol. 174. P. 257.
2. Posselt M. // Phys. Stat. Sol. (A). 1986. Vol. 94. P. 403.
3. Moller W., Eckstein W., Biersack J.P. // Comput. Phys. Commun. 1988. Vol. 51. P. 355.
4. Ziegler J.P., Manoyan J.M. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1988. Vol. B35. P. 215.
5. Ziegler J.P., Biersack J.P., Littmark U. Stopping and Ranges of Ions in Solids. Perg. Pr. New York, 1985.
6. Brandt W., Kitagawa M. // Phys. Rev. 1982. Vol. 25. № 9. P. 5631.
7. Mathar R.J., Posselt M. // Phys. Rev. (B). 1995. Vol. 51. № 1. P. 107.
8. Губарев А.А., Запороженко О.С. // Изв. РАН. Сер. физ. 1996. Т. 60. № 4. С. 166.
9. Grande P.L., Schiwietz G. // Phys. Rev. (A). 1998. Vol. 58. № 5. С. 3796.
10. Леонтьев А.В., Нечаев С.В. // Взаимодействие излучений с твердым телом: Материалы III Междунар. конф.: В 2 ч. Мн., 1999. Ч. 2. С. 156.
11. Довнар С.В., Григорьев В.В., Камышан М.А. и др. // Взаимодействие излучений с твердым телом: Материалы IV Междунар. конф. Мн., 2001. С. 15.
12. Леонтьев А.В. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2000. № 1. С. 15.
13. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. Мн., 2001.
14. Marcus H., Mendenhall K., Robert A. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1991. Vol. B58. P. 11.
15. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М., 1980.
16. Комаров Ф.Ф., Леонтьев А.В., Коньшин И.В. // Вакуумная техника и технология. 1994. Т. 4. № 4. С. 45.
17. Kabachnik N.M. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1992. Vol. B69. P. 76.
18. Фирсов О.Б. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. № 7. С. 1517.
19. Oen O.S., Robinson M.T. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1976. Vol. 132. P. 647.
20. Взаимодействие заряженных частиц с твердым телом: Сб. / Под ред. А. Грас-Марти. М., 1994.
21. Behar M., Grande P.L., Amaral L. et al. // Phys. Rev. (B). 1990. Vol. 41. № 10. P. 6145.

Поступила в редакцию 15.02.2002.

Александр Викторович Леонтьев – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники.