

ФОРМИРОВАНИЕ СЛОЕВ $C_{x \rightarrow 3}N_{y \rightarrow 4}$ МЕТОДОМ ВЫСОКОДОЗНОЙ ИМПЛАНТАЦИИ АЗОТА В СИСТЕМУ $Si_3N_4/C/Si_3N_4/Si$

А. Ф. Комаров¹⁾, В. В. Пилько¹⁾, Н. Н. Никифоренко¹⁾, В. А. Емельянов²⁾, Ч. Карват³⁾

¹⁾ Научно-исследовательский институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко, 220064, Минск, Беларусь, тел: 277-48-33, e-mail: kff@rfe.bsu.unibel.by

²⁾ НПО «Интеграл», г. Минск, Беларусь

³⁾ Технический университет, г. Люблин, Польша

В данной работе проведено исследование (эксперимент, а также компьютерное моделирование) формирования слоев $C_{x \rightarrow 3}N_{y \rightarrow 4}$ методом высокодозной имплантации азота в систему $Si_3N_4/C/Si_3N_4/Si$. Параметры легирования N^+ : $E=100$ кэВ, доза $=1.96 \times 10^{18}$ ион/см². Компьютерное моделирование проведено с помощью программы BEAM2HD [1], основанной на методе Монте-Карло, которая позволяет моделировать торможение ионов в аморфных твердых телах. Данная программа представляет возможность моделировать процесс одно- или двухпучковой высокодозной ионной имплантации в многослойные и многокомпонентные мишени. При этом число слоев не превышает трех, а число разных типов атомов в каждом слое не превышает семи. На основании данной программы проведен расчет толщины послойного распыления мишени, профиль распределения имплантированного азота в многослойной структуре, а также предложены оптимальные энергии и дозы имплантации азота для формирования слоя, близкого по стехиометрии к C_3N_4 .

Введение

Направленная модификация физико-химических свойств приповерхностных областей металлов и сплавов ионными пучками представляет собой перспективный метод обработки материалов. Целенаправленно выбирая атомы легирующей примеси и режимы облучения, с помощью метода ионной имплантации можно обеспечить широкую гамму полезных свойств поверхностных слоев материалов, таких как прочность, износостойкость, коррозионная стойкость и т.д.

Основная часть

В программе BEAM2HD при моделировании торможения и рассеяния влетающих ионов и атомов отдачи, ядерное и электронное торможение рассматриваются как отдельные процессы. При этом для ядерного рассеяния применяется аппроксимация бинарных столкновений, в то время как электронное торможение рассматривается как непрерывный процесс. Для расчета углов рассеяния на ядрах использована приближенная формула из [2], а электронные потери энергии рассчитываются в соответствии с теорией Линдхарда и других [3]. Учтено влияние следующих основных факторов, сопутствующих высокодозной ионной имплантации [1,4]:

- послойное распыление поверхности мишени;
- рассеяние имплантируемых ионов на ранее внедренных атомах примеси;
- распухание мишени в результате имплантации больших доз ионов.

Описываемая модель дает возможность описать имплантацию ионов примеси в мишень при помощи одного или двух пучков. При этом каждый пучок характеризуется своей начальной энергией, массой и зарядом ионов пучка, дозой и количеством моделируемых траекторий для каждого пучка. Каждой траектории ставится в соответствие "псевдочастица", представляющая собой некоторый интервал внедряемой дозы, по

аналогии с программами TRIDYN [5] и HIDOS [6], и моделирование траекторий каждого пучка осуществляется поочередно. Мишень может состоять не более чем из трех разных физических слоев. Изначально вся толщина мишени (моделируемая область) делится на 100 равных динамических слоев, а в процессе ионного облучения динамическое изменение состава мишени рассматривалось в соответствии с подходами, предложенными в работах [5,6]. При этом изначально каждый слой мишени (физический, а не динамический) может содержать до семи разных компонент.

Описание процессов распухания и распыления мишени в процессе высокодозной ионной имплантации подробно приводится в наших работах [1,4]. Если в результате моделирования очередной траектории "псевдочастица" остановилась в некотором глубинном (динамическом) слое, то этот слой распухает, и величина увеличения толщины данного слоя описывается формулой

$$\Delta(\Delta I) = \frac{\Delta D_{imp} \cdot 10^{-16}}{N_{imp}}(E), \quad (1)$$

где $N_{imp}(E^-)$ – атомарная плотность внедряемой примеси типа imp . Если общая доза внедряемой примеси типа imp равна D_{imp} и моделирование ионной имплантации осуществляется с помощью N_H траекторий, то каждой траектории ставится в соответствие доза $\Delta D_{imp} = D_{imp}/N_H$.

Розыгрыш столкновений ионов и атомов отдачи, а также изменение стехиометрического состава в каждом динамическом слое описаны в работе [4].

Толщина распыляемой поверхности мишени в результате налета одной "псевдочастицы" рассчитывается следующим образом [4]:

$$d_{imp} = \frac{Y(E_0)}{N_{target}} \Delta D_{imp} \cdot 10^{-16}(E), \quad (2)$$

где $N_{target}(E^-)$ – атомарная плотность мишени, а $Y(E_0)$ – коэффициент распыления.

Для расчета коэффициента распыления применялась эмпирическая формула, предложенная Ямамурой и др. [7,8], которая пригодна для всех имеющихся экспериментальных данных в широком диапазоне энергий в случае нормального падения пучка. Однако для определенного интервала энергий и комбинаций ион-атом целесообразно использовать формулу Зигмунда [9] для $Y(E_0)$ в случае перпендикулярного облучения мишени и в предположении линейного каскада [1].

На рис. 1 приведен рассчитанный на основании BEAM2HD профиль распределения ионов азота с энергией 100 кэВ и дозой 1.96×10^{18} в системе $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{C}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$. Пространственные моменты распределения имплантированного азота в системе $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{C}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$ в условиях данного эксперимента, согласно расчету, составляют: $R_p=139$ нм, $\Delta R_p=26.4$ нм, $S_k=1.50$. Последнее распыление приводит к поверхностной эрозии на 28.2 нм при дозе имплантации 1.96×10^{18} N/cm^2 .

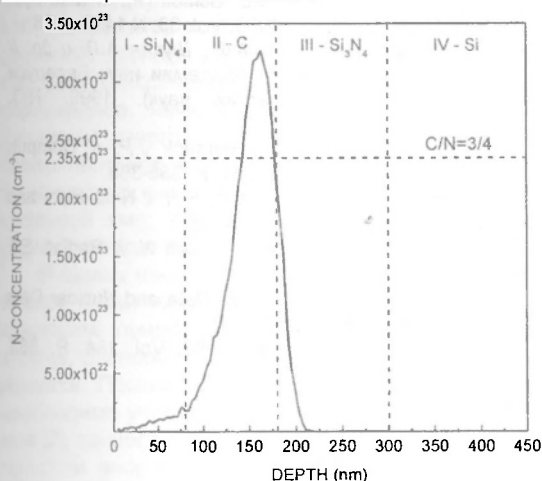


Рис. 1. Распределение по глубине азота, имплантированного в многослойную систему $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{C}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$.

Апробация разработанных моделей производилась при решении важной в прикладном аспекте задачи — использовании специальным образом замедленных пучков ускоренных ионов для проведения процессов синтеза неравновесной высокотемпературной фазы нитрида углерода, аморфизирующей и подверженной процессам декомпозиции при облучении, но обладающей уникальными механическими свойствами. Для повышения концентрации легирующей примеси и одновременного снижения энергии ионов были использованы многослойные мишени, содержащие, как минимум, два барьерных слоя на основе нитрида кремния, замедляющих диффузию азота из легируемого слоя вглубь образца и к его поверхности. Предполагалось также снизить энергию ионов вблизи границы раздела нитрид кремния/углерод до оптимальных синтезных значений (100-150 эВ). Для легирования были использованы трехслойные слои на подложках из кремния (от

поверхности в глубину):

- I- 80 нм нитрида кремния;
- II- 100 нм глобулированного алмаза;
- III-120 нм нитрида кремния.

Слои нитрида кремния формировались методом пиролитического осаждения, слои алмаза осаждались из плазмы ВЧ разряда. Доза ионного легирования была рассчитана исходя из соотношений стехиометрии $\text{C}/\text{N}=3/4$ в слое II. Энергия ионов азота подбиралась исходя из условий достижения максимальной однородности профиля распределения азота по глубине формируемой многослойной структуры. В результате расчетов были определены и реализованы в эксперименте следующие основные параметры процесса ионного легирования:

- ионы N^+ ;
- энергия 100 кэВ;
- доза легирования 1.96×10^{18} $\text{ион}/\text{cm}^2$.

Сформированные многослойные структуры исследовались методом резерфордского обратного рассеяния ионов гелия с энергией 1.5 МэВ. Типичный спектр POP представлен на рисунке 2.

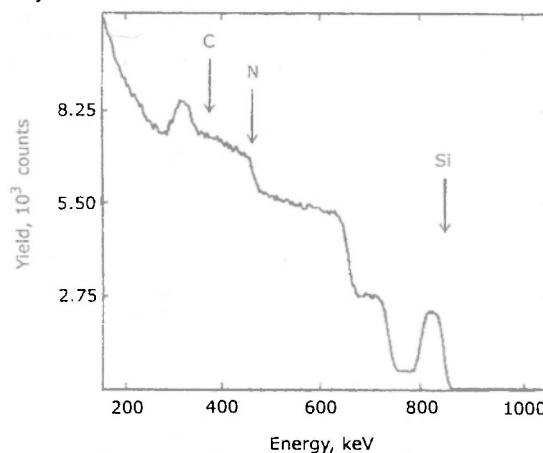


Рис. 2. Спектр POP многослойного образца после бомбардировки ионами азота с энергией 100 КэВ дозой 2×10^{18} $\text{ион}/\text{cm}^2$.

Непосредственно из рисунка видно, что толщины слоев выбраны на границе разрешения пиков углерода и азота. Толщины барьерных слоев выбирались максимальными как с целью более эффективного подавления диффузии, так и для максимального снижения энергии ионов азота в области границы раздела нитрид кремния-углерод. Обработка результатов производилась послойным подбором концентраций компонент с последующим расчетом модельного спектра POP и его сравнением с экспериментально полученным. Критерием точности служила величина статистического разброса выхода ОР. Результат обработки спектра, приведенного на рисунке 2, представлен в таблице 1.

Из таблицы видно, что использованные режимы легирования позволили реализовать практически однородное распределение азота в слое толщиной не менее 2.5×10^{18} $\text{ат.}/\text{cm}^2$, а в

Таблица 1.
Концентрации компонент в слоях после бомбардировки
ионами азота (от поверхности в глубину).

Слой	Толщина (ат/см ²)	Содержание, ат.%		
		Si	N	C
I — Si ₃ N ₄	6·10 ¹⁷	37	63	0
II — C (алмаз)	1·10 ¹⁸	7	53	40
III — Si ₃ N ₄	1·10 ¹⁸	43	57	0
Si (подложка)	2·10 ¹⁹	100	0	0

слое II соотношение C/N оказывается близким к стехиометрии нитрида углерода даже в предположении о присутствии в слое нитрида кремния. Вопрос о наличии C-N связей в синтезированном слое станет предметом наших ближайших исследований.

Заключение

Проведено экспериментальное исследование и компьютерное моделирование формирования слоев C_x-N_y методом высокодозной имплантации азота в систему Si₃N₄/C/Si₃N₄/Si. Для моделирования данного эксперимента использовалась программа BEAM2HD [1], позволяющая моделировать процесс одно- или двухпучковой высокодозной ионной имплантации в твердотельные многослойные и многокомпонентные мишени. В качестве выходных данных программы можно получить таблицы и графики распределений: имплантированных атомов, длин пробегов ионов, распределения вакансий, созданных в процессе имплантации, распределения электронных и ядерных потерь энергии имплантированных

частиц. На основании программы BEAM2HD проведен расчет профилей распределения атомов азота в многослойной системе Si₃N₄/C/Si₃N₄/Si, определена толщина послойной эрозии за счет распыления в процессе имплантации, а также предложены оптимальные параметры имплантации азота для формирования однородного слоя, близкого по стехиометрии к C₃N₄.

Данная работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и фонда поддержки науки имени И.Миановского.

Список литературы

1. Komarov A.F., Komarov F.F., Zukowski P., Karwat C., Shukan A.L. // *Nukleonika*. 1999. Vol. 44. No. 2. P. 363-368.
2. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. *The stopping and range of ions in solids*. New York: Pergamon Press, 1985.
3. Lindhard J., Scharff M. and Schiott H.E. // *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* 1963. Vol. 33. N 14. P. 1-36.
4. Комаров А.Ф., Комаров Ф.Ф., Шукан А.Л. и др. // *Известия Национальной Академии наук Беларуси (серия физико-технических наук)*. 1999. №3. С. 19-23.
5. Möller W., Eckstein W., Biersack J.P. // *Comput. Phys. Commun.* 1988. Vol. 51. P. 355-368.
6. Schonborn A., Hecking N., Kaat E.H. // *Nucl. Instr. and Meth.* 1989. Vol. B43. P. 170-175.
7. Yamamura Y., Matsunami N., Itoh N. // *Radiat. Eff.* 1983. Vol. 71. P. 65.
8. Matsunami N. et al. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. 1984. Vol. 31. N1. P. 2.
9. Sigmund P. // *Phys. Rev.* 1969. Vol. 184. P. 383.

FORMATION OF THE CARBON-NITROGEN SHEETS BY HIGH-DOSE NITROGEN IONS IMPLANTATION INTO LAYERED SILICON NITRIDE-CARBON SYSTEM

A.F.Komarov¹), V.V.Pilko¹), N.N.Nikiforenko¹), V.A.Emel'yanov²), C.Karwat³)

¹)The Institute of the Applied Physics Problems, Minsk, Belarus

²)NPO "Integral", Minsk, Belarus

³)Technical University of Lublin, 38A Nadbystrzycka St., 20-618, Lublin, Poland

The nitrogen ion implantation parameters for the layered silicon nitride-carbon structure are simulated using the program BEAM2HD and realized in the experiment. The nitrogen depth distribution was tested by RBS. The composition of the formed sheets was near to the C/N ratio of ¼. The possibility of the carbon nitride phase formation is discussed.