ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ТРЕКООБРАЗОВАНИЕ В КРЕМНИИ, ОБЛУЧАЕМОМ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ СВЕРХВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

В.Н.Ювченко

НИИ прикладных физических проблем им. А.Н.Севченко БГУ, 220064, Минск, Курчатова, 7, тел. +375-17-278-92-71 fax +375-17-277-48-33, e-mail komarovf@bsu.by

Построена модель трекообразования и фазовых превращений в полупроводниковых кристаллах при облучении тяжелыми высокознергетическими ионами, учитывающая формирование первичной высоковозбужденной области вокруг траектории иона, передачу энергии электронной подсистемы атомной в приближении термического пика, дальнейшее остывание, затвердевание в аморфной фазе и перекристаллизацию. На основании данной модели рассчитаны радиусы расплавленных областей вдоль траектории иона для кремния и германия, облучаемых ионами Bi^{*} с энергией 710 МзВ. Предполагается, что возможной причиной отсутствия регистрируемых треков в Si, облучаемом тяжелыми моноатомными ионами, является эпитаксиальная перекристаллизация аморфного ядра трековой области, полученного за счет быстрой закалки расплавленной области.

Введение

При прохождении быстрых ионов С энергиями свыше 1 МэВ/а.е.м. через вещество интенсивность выделения энергии в электронную подсистему в 10³-10⁴ раз превышает выделение энергии в ядерную подсистему. Так, в кремнии величина неупругих потерь энергии может составлять до 2-3 кэВ/Å. Высокая степень возбуждения электронной подсистемы инициирует ряд специфических эффектов, таких как локальное плавление, аморфизация, формирование треков, создание необычных фаз, неупругое распыление материалов. кристаллическом кремнии, в отличие от других полупроводниковых материалов, до настоящего времени не наблюдались треки при ионном облучении, однако при облучении фуллеренами с энергией 30 и 40 МэВ, для которых величина неупругих потерь энергии составляет 48 и 57 кэВ/нм, соответственно, были зарегистрированы цилиндрические треки диаметром 8,4-10,5 нм [1]. Для понимания этих процессов и оценки возможности формирования треков в кремнии облучении моноатомными ионами при необходимо определить механизмы релаксации электронной подсистемы, а также передачи энергии возбуждения электронов атомной подсистеме и релаксации атомной подсистемы.

Формирование высоковозбужденной области

Энергия, выделяемая ионом в электронную подсистему мишени, состоит из энергии возбуждения валентных электронов (одночастичных возбуждений), коллективных колебаний электронной плотности - плазмонов и электронов внутренних оболочек атомов мишени. Для кремния, облучаемого ионами Bi⁺ с энергией 710 МэВ, вклад одночастичных возбуждений, рассчитанный по [2], составляет 7,3 кэВ/нм, а вклады электронов внутренних оболочек и 14,8 кэВ/нм плазмонов _ И 5,0 кэВ/нм, соответственно.

Для определения спектра валентных элект-

Для неориентированной мишени потери энергии на валентных электронах выражаются как

$$\frac{dE}{dz}(\mathbf{r}) = \frac{2Z_1^2 e^2}{\pi v^2} \int \frac{dq}{q} \int \omega \operatorname{Im} \left[K(q, \omega, r) \right] d\omega, \qquad (1)$$

где Z_1 – атомный номер мишени, e – заряд электрона, v – скорость иона, r – расстояние от траектории иона, q и ω - волновой вектор и частота электрона, $K(q, \omega, r)$ – обратная диэлектрическая функция, рассчитанная для полупроводника с учетом зонной структуры в [3].

Из рассчитанного спектра электронов можно определить максимальное расстояние, на котором происходит релаксация энергии возбужденных валентных электронов (см. рис. 1). Их энергия затрачивается, в свою очередь, на возбуждение валентных электронов, плазмонов и электронов внутренних оболочек.



Расстояние, на котором плазмоны распадаются на одночастичные возбуждения, определяется прицельным параметром плазмона [4] и для кремния, облучаемого ионами Bi⁺ с энергией 710 МэВ, равно 3,2 нм.

Электроны, вырванные из внутренних оболочек атомов, также уносят значительную часть энергии. Расстояния, на которые уходят быстрые возбужденные из внутренних оболочек

38

ронов была использована модель на основе электроны, достигают значительных величин. квантового диэлектрического формализма, Так, для электрона с энергией, равной среднему предложенная в работе [3]. потенциалу ионизации внутренних оболочек

5-я международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом», 6-9 октября 2003 г., Минск, Беларусь 5-th International Conference «Interaction of Radiations with Solids», October 6-9, 2003, Minsk, Belarus кремния, составляющему 395 эВ, R_{max}=9.9 нм.

Горячие электроны термализуются за время, сравнимое с периодом плазменных колебаний (~10¹⁶ с) [4], следовательно, далее для описания электронной подсистемы можно использовать понятие электронной температуры.

Таким образом, можно считать, что основная доля энергии, выделенной в электронную подсистему, локализуется в области диаметром несколько нм вокруг траектории иона, которая состоит из атомов с полностью или частично ионизированными внешними оболочками и электронного газа с температурой несколько эВ.

Модель термического пика

Для описания передачи энергии электронной подсистемы кристалла атомной подсистеме была выбрана модель термического пика, использовавшаяся для описания трекообразования в некоторых металлах, диэлектриках и сверхпроводниках [5]. Процесс передачи энергии описывается следующей системой связанных уравнений для тепловых потоков, записанной в радиальных координатах:

$$C_{o}(T_{o})\frac{\partial T_{o}}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[rK_{o}(T_{o})\frac{\partial T_{o}}{\partial r}\right] - Q(T_{o},T_{a}) + A(r,t), \quad (2)$$

$$C_{o}(T_{o})\frac{\partial T_{a}}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[rK_{o}(T_{a})\frac{\partial T_{a}}{\partial r}\right] + Q(T_{o},T_{a}),$$

где С_е и K_e, С_e и K_a – теплоемкость и теплопроводность электронной и атомной подсистем соответственно; T_e и T_a – температуры электронов и решетки; Q – коэффициент, характеризующий передачу энергии от электронов решетке; A – плотность энергии, переданной в электронную подсистему.

Для плотности энергии *A*(*r*,*t*) используем выражение, предложенное в [5]:

$$A(r,t) = b \frac{dE}{dz} \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2t_0^2}\right) F(r),$$
 (3)

где dE/dz — линейные неупругие потери энергии иона; t_0 — время, необходимое для того, чтобы электроны достигли равновесного распределения (время свободного пробега δ -электронов средней энергии: $t_0 \sim (1+5) \cdot 10^{-15}$ с); b — нормировочная константа; F(r) — функция пространственного распределения энергии электронной подсистемы.

Теплофизические параметры Si в широком диапазоне температур были взяты из [6, 7]. Также были учтены скрытые теплоты плавления и испарения.

 $K_e(T_e)$ Значения $C_e(T_e)$ и для полупроводников для всех возможных электронных температур, строго говоря, неизвестны. Было использовано предположение авторов [5] о том, что горячие электроны в зоне проводимости изолятора ведут себя подобно горячим электронам металла.

Для определения Q был проведен расчет

кремния необходимо учитывать деформационное рассеяние на акустических фононах, а также междолинное деформационное рассеяние на оптических фононах. Однако для промежутков времени, меньших одного периода колебаний решетки (~10⁻¹³ с) после пролета иона, не имеет смысла говорить о фононах и электронфононном взаимодействии. Поэтому для данного временного интервала была использована модель передачи энергии от электронов ионам, предложенная в [9], в которой рассматривается взаимодействие электронной плазмы с практически неподвижными индивидуальными ионами.

Результаты численного моделирования

На рис. 2 представлены температурные поля, рассчитанные для кремния, облучаемого ионами Bi⁺ с энергией 710 МэВ. Максимальный радиус расплавленной области составляет 4,5 нм, время ее существования ~2 пс. Следует отметить, что для кремния эти величины минимальны по сравнению со всеми остальными полупроводниками, для которых были проведены расчеты в рамках данной модели (Ge, GaAs, InP).

Для сравнения на рис. З приведен рассчитанный температурный профиль для германия, облучаемого ионами Ві⁺ с *E*=710 МзВ. Максимальный радиус расплавленной области равен 11,5 нм, время существования ~7 пс. Экспериментальные исследования методом просвечивающей электронной микроскопии показывают наличие в Ge прерывистых треков радиусом 5–10 нм [10].



Рис. 2. Температурные зависимости для кристаллов Si,

39

всех видов электрон-фононного взаимодействия в широком диапазоне электронных и атомных температур согласно [8]. Расчет показал, что для оолученных ионами ВГ с E=/10 M3B: а) зависимость температуры решетки от расстояния до траектории иона; b) зависимость температуры решетки от времени

5-я международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом» 6-9 октября 2003 г., Минск, Беларусь 5-th International Conference «Interaction of Radiations with Solids», October 6-9, 2003, Minsk, Belarus Отсутствие треков в кремнии может объясняться либо тем, что в процессе остывания происходит эпитаксиальная кристаллизация жидкого Si, либо образованием аморфного ядра трековой области и его последующей эпитаксиальной перекристаллизацией на стадии остывания.



Рис. 3. Зависимость температуры решетки от расстояния до траектории иона для кристаллов Ge, облученных ионами Bi^{*} с *E* = 710 МэВ

Известно, что при скоростях движения фронта кристаллизации свыше 20 м/с в кремнии происходит срыв ориентированной кристаллизации и образуется аморфный слой [11]. Вычисленная в нашей модели скорость движения фронта кристаллизации составляет ~1100 м/с, что не позволяет говорить об эпитаксиальной кристаллизации из расплава. Более вероятным представляется механизм перекристаллизации созданной аморфной фазы при дальнейшем снижении температуры. Скорости перекри-(100) при сталлизации в направлении температуре затвердевания аморфной фазы для Si и Ge, вычисленные по данным из [12], близки и составляют 5.10⁻⁴ м/с и 3.10⁻⁴ м/с, соответственно, что позволяет предположить полную перекристаллизацию более узкого аморфного ядра трека в кремнии и частичную - в германии.

Заключение

Предложена модель трекообразования и фазовых превращений для полупроводников, облучаемых высокоэнергетическими тяжелыми ионами. Проведены расчеты температурных полей для кремния, облучаемого ионами ВІ⁺ с энергией 710 МэВ. Предполагается образование аморфного ядра трековой области и его последующая перекристаллизация. Для сравнения также проведены расчеты для германия, в котором экспериментально обнаружено наличие прерывистых треков. Получено хорошее соответствие рассчитанных диаметров треков с экспериментальными данными.

Список литературы

- Canut B., Bonardi N., Ramos S.M.M., Della-Negra S. II Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. - 1998. - Vol. 146. - P. 296.
- Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И.Ленина, 1979. – 320 с.
- Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А. II ЖЭТФ. - 1980. - Т. 78, № 4. - С.1474.
- Баранов И.А., Мартыненко Ю.В., Цепелевич С.О., Явлинский Ю.Н. // Успехи физических наук. - 1988. -Т. 156, № 3. - С. 477.
- Toulemonde M., Dufour C., Meftah A., Paumier E. II Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. - 2000. - Vol. 166-167. - P.903.
- Охотин А.С., Пушкарский А.С., Горбачев В.В. Теплофизические свойства полупроводников. - М.: Атом, 1972. - 200 с.
- Landölt M., Börnstein J. Series "Numerical data and functional relationships in science and technology". New series. - Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1982. - Vol. 17a. - 642 pp.
- Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. -М.: Наука, 1984. - 352 с.
- Volkov A.E., Borodin V.A. // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. - 2002. - Vol. 193. - P. 381.
- Komarov F.F., Gaiduk P.I., Didyk A.Ju., Wesch W., Vlasukova L.A., Yuvchenko V.N. // Proceed. 6th international conference on modification of materials with particle beams and plasma flows. -. Tomsk, 2002 -P.199.
- Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. – Минск: УП "Технопринт", 2001. – 392 с.
- BorisenkoV.E., Hesketh P.J. Rapid thermal processing of semiconductors. – New York: Plenum Press, 1997. – 358 pp.

PHASE TRANSFORMATIONS AND TRACK FORMATION IN SILICON IRRADIATED WITH HEAVY SUPERHIGH ENERGY IONS

Vera Yuvchenko

Institute of Applied Physics Problems, 7 Kurchatova Str., 220064 Minsk, Belarus, phone +375-17-278-92-71, fax +375-17-277-48-33, e-mail komarovf@bsu.by

A model of track formation and phase transformations in semiconductor crystals irradiated with heavy superhigh-energy ions has been developed. The model takes into account the formation of an initial highly excited region along the ion trajectory, energy transfer from the electronic subsystem into the lattice subsystem considered within the framework of a thermal spike approach, and the following cooling down, solidification in the amorphous phase and recrystallization. On the basis of this model the radii of the melted regions along the ion trajectory were calculated for Si and Ge crystals irradiated with 710 MeV Bi⁺ ions. It is supposed that the epitaxial recrystallization of the amorphous core of the track appeared due to the fast quenching of the melted region is the probable reason for the absence of registered tracks in crystalline Si irradiated with heavy monoatomic ions.

40

5-ч международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом» 6-9 октября 2003 г., Минск, Беларусь 5-th Internationa Conference «Interaction of Radiations with Solids», October 6-9, 2003, Minsk, Belaru