

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛИЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ВЫСОКОДОЗНОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ В МЕТАЛЛЫ И ПОЛУПРОВОДНИКИ

А.Ф. Буренков¹⁾, А.М. Миронов²⁾, В.А. Цурко³⁾

¹⁾ *Fraunhofer-Institut fuer Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie
Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany, E-Mail: alexander.burenkov@iisb.fraunhofer.de
Telefon: +49-9131-761-255, Fax: +49-9131-761-212*

²⁾ *НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, Минск,
220064, Беларусь, тел. +375(17)278-92-71, e-mail: komaraf@bsu.by*

³⁾ *Институт математики НАН Беларуси, ул. Сурганова, 11, Минск, 220072, Беларусь,
тел. +375(17)284-19-64, e-mail: vtsurko@im.bas-net.by*

Разработаны физико-математические модели и проведено численное моделирование процесса полиэнергетической высокодозной имплантации ионов азота в железо. Модель моноэнергетической высокодозной имплантации ионов азота в железо базируется на численном решении диффузионных уравнений химической кинетики. Для моделирования процесса полиэнергетической высокодозной имплантации ионов азота в железо был использован метод покоординатного спуска, модифицированный применительно к задаче минимизации функции на параллелепипеде.

Введение

Модификация физико-химических свойств приповерхностных областей металлов и сплавов ионными пучками заряженных частиц представляет собой перспективный метод радиационной обработки материалов [1]. То, что атомы примеси при моноэнергетическом ионном легировании распределяются в мишени в сильной мере неравномерно (их распределение по глубине имеет форму кривой с максимумом), в некоторых случаях является недостатком этого метода легирования. Получить равномерное распределение имплантированной примеси можно, применяя полиэнергетическую ионную имплантацию, то есть облучение легируемого образца при различных энергиях налетающих частиц. Однако, для этого необходимо знать, как выбрать спектр энергий бомбардирующих ионов, с тем, чтобы получить заданное распределение примеси по глубине мишени.

Моделирование процесса низкодозной (доза $D < 1 \times 10^{18}$ ион/см²) полиэнергетической ионной имплантации нами проводилось в работах [2, 3]. Однако для модификации приповерхностных слоев материалов методом ионной имплантации с целью достижения таких полезных свойств как прочность, износостойкость, коррозионная стойкость и др. требуются более высокие дозы ионов ($D > 1 \times 10^{16}$ ион/см²) [1]. При таких дозах существенным фактором становится влияние ранее внедренной примеси на профили распределения последующих ионов.

В ряде наших работ [4–9] проведено экспериментальное и теоретическое исследование процессов высокодозной моноэнергетической ионной имплантации азота в железо [4–6] и медь [7–9]. При расчетах профилей внедренных атомов, при высоких дозах ионов, требуемых для синтеза новых фаз (до 10^{18} ион/см²), проведен учет: распыления и распухания матрицы, рассеяния и торможения ионов на атомах внедренных примесей, образования новых фаз, а также радиационно-стимулированной диффузии.

В данной работе приведены физико-математическая модель полиэнергетической высокодозной ионной имплантации и результаты численного моделирования процесса формирования нитридных фаз с помощью имплантации ионов азота в железо. Данная модель позволяет рассчитать технологические параметры высокодозной ионной имплантации для формирования равномерно легированных слоев в металлах и полупроводниках.

Расчет параметров полиэнергетической ионной имплантации методом покоординатного спуска

Моделирование процесса моноэнергетической высокодозной ионной имплантации осуществлялось на основании численного решения диффузионных уравнений химической кинетики, приведенных в работе [7]. Решение данных уравнений позволяет получить распределение примеси в процессе набора дозы при заданной энергии в режиме моноэнергетической ионной имплантации и сформировать базу данных, содержащую профили распределения имплантированной примеси $f_i(E_i, D_i, z)$ в некотором интервале энергий:

$$0 < E_i < E_{\max} \text{ для } 0 < D_i < D_{\max}, i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $E_{\max}$ и $D_{\max}$ — максимальные энергия и доза ионной имплантации. Пусть на основании имеющихся данных необходимо оптимальным образом сформировать однородный по глубине профиль концентрации $C(z, t) = \text{const}$ на отрезке $Z = [a, b]$. Тогда задача может быть сформулирована следующим образом: найти вектор

$$u \in U = (E_1, \dots, E_N, D_1, \dots, D_N), \quad (2)$$

где

$$0 < E_i < E_{\max}, 0 < D_i < D_{\max},$$

минимизирующий на указанном множестве функционал

$$J(u) = \max_{z \in Z} \left\| \sum_{i=1}^N f_i(E_i, D_i, z) - C \right\|. \quad (3)$$

Для нахождения минимума функционала был использован метод покоординатного спуска, мо-

дифференцированный применительно к задаче минимизации функции на параллелепипеде [10].

Обозначим $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ — единичный координатный (базис) вектор, у которого i -я координата равна 1, остальные равны нулю $i = 1, \dots, n$, $n = 2N$. Пусть u_0 — некоторое начальное приближение, а α_0 — некоторое положительное число, являющееся параметром метода. Допустим, что нам уже известны точки $u_k \in U$ и число $\alpha_k > 0$ при каком-либо $k > 0$. Положим

$$p_k = e_{i_k}, \quad i_k = k - n \left[\frac{k}{n} \right] + 1. \quad (4)$$

где $\left[\frac{k}{n} \right]$ означает целую часть числа k/n . Условие

(4) обеспечивает циклический перебор координатных векторов $e_1, e_2, \dots, e_n$, т.е.

$$p_0 = e_1, \dots, p_{n-1} = e_n, p_n = e_1, \dots, p_{2n-1} = e_n, p_{2n} = e_1, \dots$$

Составим точку $u_k + \alpha_k p_k$ и проверим условия

$$u_k + \alpha_k p_k \in U, J(u_k + \alpha_k p_k) < J(u_k). \quad (5)$$

Если оба условия (5) выполняются, то примем

$$u_{k+1} = u_k + \alpha_k p_k, \alpha_{k+1} = \alpha_k. \quad (6)$$

В том случае, если хотя бы одно из условий (5) не выполняется, то определяем точку $u_k - \alpha_k p_k$ и проверяем условия

$$u_k - \alpha_k p_k \in U, J(u_k - \alpha_k p_k) < J(u_k). \quad (7)$$

В случае выполнения обоих условий (7) положим

$$u_{k+1} = u_k - \alpha_k p_k, \alpha_{k+1} = \alpha_k. \quad (8)$$

Назовем $(k+1)$ -ю итерацию удачной, если выполняется хотя бы одна из пар неравенства (5) или (7). Если $(k+1)$ -я итерация неудачная, т.е. не выполняются оба неравенства в условиях (5) и (7), то полагаем

$$u_{k+1} = u_k, \alpha_{k+1} = \begin{cases} \lambda \alpha_k, & i_k = n, u_k = u_{k-n+1}, \\ \alpha_k, & i_k \neq n \text{ или } u_k \neq u_{k-n+1}, \\ \text{или } 0 < k < n-1; \end{cases} \quad (9)$$

Здесь $\lambda (0 < \lambda < 1)$ — фиксированное число, являющееся параметром метода. Условие (9) означает, что если за один цикл из n итераций при переборе направлений всех координатных осей $e_1, e_2, \dots, e_n$ с шагом α_k реализовалась хотя бы одна удачная итерация, то длина шага не дробится и сохраняется на протяжении по крайней мере следующего цикла из n итераций. Если же среди последних n итераций не оказалось ни одной удачной итерации, то шаг α_k дробится. Таким образом, если на итерации с номером $k = k_m$ произошло дробление α_k , то

$$J(u_{k_m} + \alpha_{k_m} e_i) \geq J(u_{k_m}), J(u_{k_m} - \alpha_{k_m} e_i) \geq J(u_{k_m}) \quad (10)$$

при всех $i = 1, 2, \dots, n$.

Таким образом, метод покоординатного спуска для задачи (3) описан. На основании данной модели разработана программа, предназначенная для моделирования процесса создания однородных по концентрации слоев примеси от поверхности образца или на заданном интервале глубин при помощи полиэнергетической ионной имплантации.

Формирование однородных нитридных фаз железа методом полиэнергетической ионной имплантации азота

На основании метода покоординатного спуска (1)–(10) и модели высокодозной ионной имплантации проведено численное моделирование процесса формирования равномерно легированных слоев железа азотом в заданном интервале глубин с учетом явлений распыления и набухания мишени, изменения тормозных свойств мишени, радиационно-стимулированной диффузии примеси и образования новых фаз.

В качестве преобладающей синтезируемой нитридной фазы в железе нами выбиралась фаза Fe_3N для доз имплантируемых ионов $4 \times 10^{17} - 5,7 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ [4]. Значения параметров моделирования взято из работы [4], как реализующее наилучшее соответствие экспериментальных и теоретических профилей распределения азота в железе.

Таблица 1. Параметры полиэнергетической ионной имплантации азота для формирования равномерно легированных слоев в железе при плотности ионного тока 20 мкА/см^2

Энергия, кэВ	Доза, ион/см ²	Время набора дозы, с
270	$4,9 \times 10^{17}$	3957
125	$2,8 \times 10^{17}$	2269
29	$9,9 \times 10^{16}$	794
15	$2,5 \times 10^{16}$	200

В табл. 1 приведены рассчитанные с помощью программы MODEL_P параметры полиэнергетической ионной имплантации азота в железо, необходимые для формирования равномерно легированного слоя толщиной 300 нм от поверхности с концентрацией азота $2,83 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

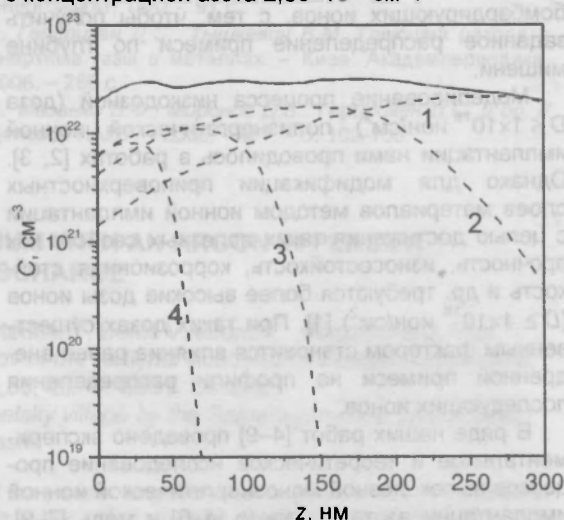


Рис. 1. Расчетные распределения азота, полученные при полиэнергетической имплантации азота в железо для заданной концентрации азота: $2,83 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Пунктир — графики концентраций внедренной примеси, для различных энергий и доз имплантации азота в железо, сплошная линия — суммарная концентрация азота.

На рис. 1 изображены рассчитанные распределения атомов азота, имплантированного в же-

лезную мишень. Приведены графики суммарной концентрации и профили, соответствующие отдельным энергиям ионной имплантации. Видно, что полиэнергетическая имплантация ионов азота при количестве энергий, равном четырем, позволяет сформировать равномерные распределения внедренного азота с концентрациями, соответствующие нитридным фазам близким к Fe_3N (рис. 1) на глубине от поверхности мишени до 300 нм.

Заключение

Разработана физико-математическая модель, позволяющая анализировать процесс формирования однородных по физико-химическим свойствам нитридных слоев в железе при помощи высокодозной полиэнергетической имплантации атомов азота в железо. На основании данной модели разработана программа MODEL_P, предназначенная для моделирования процесса создания однородных по концентрации слоев примеси от поверхности образца или на заданном интервале глубин при помощи полиэнергетической ионной имплантации. При этом толщина равномерно легированного слоя определяется только максимально возможной энергией пучка. Модель полиэнергетической ионной имплантации и соответствующая программа универсальны, так как используют параметры моноэнергетических профилей распределения имплантированной примеси, ранее рассчитанных и внесенных в информационную базу.

Благодарности

Авторы благодарны профессору И.Е. Мозолевскому и доценту Е.С. Чеб за оказанную помощь в составлении эффективного алгоритма нахождения минимума функционала.

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проекты Ф06-208 и Т05К-041).

Список литературы

1. Комаров Ф.Ф. Ионная имплантация в металлы. М.: Металлургия, 1990. – 216 с.
2. Комаров Ф.Ф., Миронов А.М. Создание межэлементной изоляции в полупроводниковых структурах на основе фосфида индия с помощью полиэнергетической ионной имплантации // "Микроэлектроника" 1998, Т. 27, №5, с. 362–366.
3. Komarov F.F., Kamyshan A.S., Lagutin A.E., Martynov I.S. Formation of device isolation in GaAs with polyenergetic Ion Implantation // Vacuum 63 (2001) 577–579.
4. Бойко Е.Б., Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф., Федотов С.А. Распределение внедренных АТОМОВ И фазовые превращения в металлах // ЖТФ. – 1994. – Т. 64, № 6. – С. 106–112.
5. Tarkowski P., Komarow A.F., Komarow F.F. O zmianach strukturalnych w zelazie i stalach po Implantacji jonami azotu // Folia Societatis nensis. – 1995. – Vol. 4, №2. P 40–49.
6. Tarkowski P., Budzynski P., Komarov F.F., Komarov A.F. Certain aspects of modifying the corrosion resistance by ion implantation of a steel // Ion Implantation of Science and Technology: Internat. Symp. – Lublin, Poland, 1997. – P. 7–15.
7. Żukowski P., Karwat Cz., Komarov F.F., Komarov A.F. Formation of copper nitrides in the course of implanting copper with large doses of nitrogen ions // Phys. Stat. Sol. – 1996. – Vol. 157. – P 373–378.
8. Комаров А.Ф., Францкевич А.В. Высокоинтенсивная ионная имплантация азота в медь и латунь // Взаимодействие ионов с поверхностью: Матер. XII Международ. конф. – Москва, 1995. – Т. 2. – С. 268–271.
9. Комаров Ф.Ф., Жуковски П., Карват Ч., Комаров А.Ф. Моделирование процесса имплантации меди большими дозами ионов азота с одновременным осаждением углеродной пленки // Доклады НАН Беларуси. – 1999. – Т. 43, №6. – С. 42–44.
10. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988. – 552 с.

THE FORMATION OF UNIFORMLY DOPED LAYERS IN METALS AND SEMICONDUCTORS WITH HIGH-FLUENCE POLYENERGETIC ION IMPLANTATION

A.F. Burenkov¹⁾, A.M. Mironov²⁾, V.A. Tsurko³⁾

¹⁾ Fraunhofer-Institut fuer Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie
Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany, E-Mail: alexander.burenkov@iisb.fraunhofer.de
Telefon: +49-9131-761-255, Fax: +49-9131-761-212

²⁾ Institute of Applied Physics Problems, Belarusian State University, 7 Kurchatov Street, Minsk, Belarus 220064,
e-mail: KomarovF@bsu.by

³⁾ Institute of Mathematics, Academy of Sciences of Belarus, 11 Surganova Street, Minsk, Belarus 220072,
e-mail: vturko@im.bas-net.by

A model of polyenergetic ion implantation with high fluence has been developed. The model allows evaluating ion implantation parameters in order to form uniformly doped layers in metals and semiconductors. Model calculations were performed for the implantation of nitrogen ions in iron target with the purpose of nitride phase formation in surface region.