

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ В МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРАХ***

УДК 539.1.043.001.1 : 621.315.592 : 548.55

А. Г. КАДМЕНСКИЙ, Н. Ю. ЛЕБЕДЕВ
(Москва)

ПЕРЕНОС ИОНОВ В КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ КАНАЛИРОВАНИЯ

Широкое применение имплантации для легирования материалов твердотельной электроники требует развития методов моделирования распространения заряженных частиц в конденсированных средах, в частности учета каналирования в монокристаллических мишенях.

Явление каналирования, приводящее к аномально малым потерям энергии и как следствие большим пробегам ионов, возникает при ориентации пучка ионов, близкой к низкоиндексным направлениям кристаллической решетки [1]. Чтобы избежать осевого каналирования, предлагалось наклонять кристалл при имплантации на угол, близкий к удвоенному значению критического угла осевого каналирования. Однако оказалось, что распределение легирующих примесей по глубине может быть сильно неоднородным из-за «захвата» в режим плоскостного каналирования (наряду с осевым). Эксперименты последних лет [2] показывают, что, с одной стороны, при имплантации можно выбрать направления, приводящие к минимизации эффектов каналирования, причем при уменьшении энергии пучка таких направлений становится все меньше; с другой стороны, при любой ориентации распределение имплантированных ионов значительно отклоняется от аналогичной зависимости в аморфной мишени (см., например, [2] и цитируемую в ней литературу). Поэтому необходимы методы расчета, явным образом учитывающие характер движения ионов в монокристаллической мишени. Прежде всего нужно описать динамику частиц, попавших в режим каналирования на поверхности кристалла, и их постепенное деканалирование — переход в режим движения, соответствующий ситуации общего положения (будем называть его «стохастическим»). Затем необходимо описать движение в стохастическом режиме и учесть вероятность реканалирования. Заметим, что при описании процессов многократного рассеяния и торможения ионов необходимо учитывать вклады ядер атомов кристаллической решетки, находящихся в тепловом движении, электронов, локализованных вблизи ядер атомов, а также нелокализованных, образующих электронный газ твердого тела, примесей и дефектов, в том числе вносимых при имплантации. Все это существенно осложняет задачу определения профиля остановившихся ионов в кристалле по сравнению с аморфным телом.

В данной работе предложено два подхода к решению поставленной задачи. Первый подход — «аналитический» — базируется на решении уравнения типа Фоккера — Планка для функции распределения ионов по энергии поперечного движения. Второй подход основан на статистическом моделировании процессов переноса, причем в качестве элементарного

* В настоящем разделе журнала «Автометрия» представлены материалы II Совещания по численному моделированию полупроводниковых приборов (Новосибирск, Академгородок, 8—10 января 1985 г.).

акта взаимодействия рассматривается рассеяние иона цепочкой атомов в предположении бинарности столкновений — модель БСЦ.

Аналитический подход. В настоящее время отсутствует полное описание перечисленных выше режимов движения имплантированных ионов. Теория каналирования [1, 3] детально разработана лишь для относительно тонких слоев кристалла (расчет выхода обратного резерфордского рассеяния). В качестве первого шага в решении задачи о распределении остановившихся ионов в кристалле рассмотрим движение ионов в режиме осевого каналирования, пренебрегая рассеянием на дефектах.

Описание единичного акта рассеяния иона атомом кристаллической решетки проводится обычно в рамках статистического потенциала Тома-са — Ферми

$$V(R) = ((z_1 z_2 e^2)/R) \varphi(R/a_{TF}), \quad (1)$$

где z_1, z_2 — атомные номера иона и атома соответственно; R — расстояние между ними; φ — универсальная функция экранирования с характерным размером a_{TF} . При падении на кристалл под малым углом к кристаллографической оси ион испытывает последовательность скоррелированных столкновений, которая может быть описана введенным Линдхардом [1] эффективным потенциалом атомной цепочки

$$U(r_{\perp}) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} V(R = \sqrt{z^2 + r_{\perp}^2}) dz \simeq E \psi_1^2 \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{r_{\perp}^2} \right), \quad (2)$$

r_{\perp}, z — соответственно поперечная и продольная координаты (относительно оси канала); d — период по оси z ; E — энергия ионов; $\psi_1 = \sqrt{\frac{2z_1 z_2 e^2}{Ed}}$ — критический угол Линдхарда. Эффективный потенциал применим при условии малости угла ψ импульса иона относительно оси цепочки по сравнению с критическим углом, а именно

$$\psi < \psi_c = \begin{cases} \psi_1, & E > E' = 2z_1 z_2 e^2 d / a_{TF}; \\ \psi_2 = \left(\frac{a_{TF} \psi_1}{d} \sqrt{\frac{3}{2}} \right)^{1/2}, & E < E'. \end{cases} \quad (3)$$

При прохождении малой по сравнению с длиной пробега толщины кристалла, согласно гипотезе Линдхарда, наступает статистическое равновесие в фазовой плоскости поперечного относительно оси осевого канала движения.

В этих условиях можно ввести функцию распределения $g(\varepsilon_{\perp}, z)$ по безразмерным поперечным энергиям

$$\varepsilon_{\perp} = (2E_{\perp}) / (E \psi_1^2) \quad (4)$$

для каналированных частиц на глубине z от поверхности кристалла и записать уравнение Линдхарда — Бондрупа [4], описывающее эволюцию g :

$$\frac{\partial g}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\perp}} \left\{ A(\varepsilon_{\perp}) D(\varepsilon_{\perp}) \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\perp}} \frac{g(\varepsilon_{\perp}, z)}{A(\varepsilon_{\perp})} \right] \right\}, \quad (5)$$

где $A(\varepsilon_{\perp})$ — площадь канала, доступная для иона с поперечной энергией ε_{\perp} , т. е. площадь, на которой $U_t(\mathbf{r}_{\perp}) \leq \varepsilon_{\perp}$,

$$a \quad U_t = \sum_{i=1}^m U(|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}_{\perp i}|) \quad (6)$$

— полный потенциал канала, образованного m атомными цепочками; $D(\varepsilon_{\perp})$ — коэффициент диффузии:

$$D(\varepsilon_{\perp}) = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}^2}{\Delta z} \right\rangle = \frac{1}{A(\varepsilon_{\perp})} \int_0^{\varepsilon_{\perp}} A(\varepsilon'_{\perp}) \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle d\varepsilon'_{\perp}, \quad (7)$$

$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle$ — средняя скорость изменения поперечной энергии с глубиной; $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по ансамблю [1]:

$$\langle F(\varepsilon_{\perp}) \rangle = \frac{1}{A(\varepsilon_{\perp})} \int_{U_t < \varepsilon_{\perp}} F(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{p}_{\perp}) d\mathbf{r}_{\perp}. \quad (8)$$

Начальное условие

$$g_0(\varepsilon_{\perp}, z=0) = \frac{1}{A_0} \left| \frac{dA(\varepsilon_{\perp})}{d\varepsilon_{\perp}} \right|, \quad A_0 = \frac{1}{Nd} = \pi r_0^2 \quad (9)$$

берется обычно при нормальном падении пучка ионов на поверхность кристалла; N — атомная плотность кристалла. Граничным условием является естественное требование зануления функции распределения на бесконечности.

Средняя скорость изменения поперечной энергии с глубиной имеет вид

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta z} \right\rangle = \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle_e + \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle_n, \quad (10)$$

где первый член соответствует рассеянию на электронах (e), а второй — рассеянию на ядрах (n).

Для постоянной электронной плотности

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle_e = \left(\frac{\pi z_1^2 e^2 d}{E z_2} \right) \rho L_{\psi}(\rho, v). \quad (11)$$

Здесь ρ — плотность электронов; v — скорость частицы. Для высоких скоростей в электронном газе [5]

$$L_{\psi} = \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_p} \quad (12)$$

с плазменной частотой

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi \rho e^2}{m_e} \right)^{1/2} \quad (13)$$

m_e — масса электрона. Плотность электронов ρ остается постоянной лишь вблизи середины канала. Вблизи «стенок» — атомных цепочек — ρ определяется из уравнения Пуассона для потенциала канала U_t с соответствующим усреднением по микроканоническому поперечному распределению. Подробности описания рассеяния на электронах можно найти в [6].

Второй член в (10) отвечает рассеянию ионов на ядрах атомов, колеблющихся вблизи узлов решетки, и поэтому определяется z_2 и температурой кристалла [7, 8]:

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle_n = \left(\frac{d\Omega_n^2}{dz} \right)_a \frac{2}{\Psi_1^2} \{ K \eta_1 \gamma_n(\varepsilon_{\perp}) + \eta_2 \}; \quad (14)$$

$$\gamma_n(\varepsilon_{\perp}) = \frac{u_{\perp}^2}{3a_{TF}^2 L_n} \left(\exp(\varepsilon_{\perp}) + \frac{2}{3} \right) (1 - \exp(-\varepsilon_{\perp}))^3; \quad (15)$$

$$\eta_1 = 1 - \eta_2 \left(1 - \frac{r_m^2}{u_{\perp}^2} \right); \quad \eta_2 = \exp \left(-\frac{r_m^2}{u_{\perp}^2} \right). \quad (16)$$

Здесь $(d\Omega_n^2/dz)_a$ — средний квадрат угла многократного ядерного рассеяния аморфной среды; $L_n = \ln \frac{1,29 a_{TF} M_1}{\Lambda (M_2 + M_1)}$; Λ — кулоновский диаметр столкновения; M_1, M_2 — массы иона и атома среды соответственно. Выражение (15) заменяет член в фигурных скобках в (14) в подходе Линд-

харда [1]; η_1 и η_2 — поправочные функции, делающие (14) справедливым при любых значениях поперечной энергии. Фактор K описывает вклад одновременных пространственных корреляций тепловых одномерных смещений u_i близкорасположенных атомов

$$K = 1 + \sum_{i \neq j} \frac{\langle u_i u_j \rangle_T}{\langle u_i^2 \rangle_T}, \quad (17)$$

$\langle \dots \rangle_T$ — тепловое среднее по кристаллу, а суммирование идет по атомному ряду;

$$u_{\perp}^2 \equiv \langle u_{\perp}^2 \rangle_T \quad (18)$$

средний квадрат поперечных тепловых смещений, в дебаевском приближении являющийся линейной функцией температуры кристалла. Радиус r_m — решение уравнения

$$f(r_{\perp}) = \frac{2U(r_{\perp})}{E\psi_1^2} = \varepsilon_{\perp}. \quad (19)$$

Выражение (14) при $K=1$ (т. е. без учета тепловых корреляций) при малых поперечных энергиях переходит в выражение γ_n Линдхарда, а при больших — описывает свойства аморфной среды [8]. При этом оно достаточно точно при промежуточных значениях, что выгодно отличает его от широко используемых приближений (см., например, [6, 10]).

В (5) не учтено изменение энергии E с глубиной, что оправдано лишь для наиболее интересного с практической точки зрения случая не слишком малых энергий ионов.

В приближении отсутствия перекрытия потенциалов атомных рядов, образующих канал (т. е. при пренебрежении эффектами сверхканалирования), $U_i \sim U$ и $A(\varepsilon_{\perp}) \simeq \pi(r_0^2 - r_m^2(\varepsilon_{\perp})) \simeq \pi r_0^2$, так что (5) упрощается:

$$\frac{\partial g}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\perp}} D(\varepsilon_{\perp}) \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\perp}} g(\varepsilon_{\perp}, z), \quad (20)$$

где

$$D(\varepsilon_{\perp}) = \int_0^{\varepsilon_{\perp}} \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z}(\varepsilon'_{\perp}) \right\rangle d\varepsilon'_{\perp}. \quad (21)$$

Средняя скорость изменения поперечной энергии (10) почти постоянна в двух физически важных областях: 1) при малых ε_{\perp} , соответствующих движению вблизи центра канала, где преобладает рассеяние на электронах и $\rho_e = \text{const}$; 2) при больших ε_{\perp} , где преобладает рассеяние на ядрах и (14) описывает свойства аморфной среды, не зависящие от ε_{\perp} . При этом

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle \simeq \text{const} = b; \quad D = b\varepsilon_{\perp} \quad (22)$$

и можно получить аналитическое выражение для функции Грина уравнения (20):

$$G(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\perp}^0, z) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{\perp}^0}{\sigma}\right) I_0\left(\frac{2(\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\perp}^0)^{1/2}}{\sigma}\right), \quad (23)$$

где I_0 — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка; $0 \leq \varepsilon_{\perp} < \infty$; $0 \leq \varepsilon_{\perp}^0 < \infty$:

$$\sigma = bz. \quad (24)$$

Если ввести естественное обобщение

$$\sigma = \int_0^z \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z} \right\rangle dz, \quad (25)$$

где под интегралом стоит переменная величина, то выражение (23) описет распределение по ε_{\perp} потока на глубине z при значении на поверхности ε_{\perp}^0 . Прямое сравнение углового распределения, даваемого (23), (25), с экспериментальными угловыми распределениями протонов с энергией 500 кэВ, прошедших тонкий слой монокристалла золота в направлении, близком к оси $\langle 110 \rangle$ при комнатной температуре [11], показало их удовлетворительное согласие.

Чтобы учесть изменение полной энергии при движении в осевом канале, дополним выражение (23) дельтаобразным множителем (модель непрерывного торможения) [8]:

$$G(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\perp}^0, E, E_0, z) = G(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\perp}^0, z) \delta(E - w(E_0, \varepsilon_{\perp}, z)), \quad (26)$$

где параметры новой функции Грина выбираются на каждом шаге Δz из условий минимизации отклонения от точной функции Грина, которые записываются в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} d\sigma/dz = \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta z}(\bar{\varepsilon}_{\perp}, w) \right\rangle; \\ dw/dz = - \left\langle \frac{\Delta E}{\Delta z}(\bar{\varepsilon}_{\perp}, w) \right\rangle; \\ \bar{\varepsilon}_{\perp} = \varepsilon_{\perp}^0 + \sigma \end{cases} \quad (27)$$

с начальным условием

$$\sigma(\varepsilon_{\perp}^0, E_0, 0) = 0; \quad w(\varepsilon_{\perp}^0, 0) = E_0. \quad (28)$$

Первые два уравнения (27) основаны на значениях среднестатистических скоростей изменения поперечной и полной энергий иона с глубиной. При этом, [1]

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\Delta E(\varepsilon_{\perp}, w)}{\Delta z} \right\rangle &= \left(\frac{\Delta E}{\Delta z}(w) \right)_{ae} (1 - \alpha(w) \exp(-\varepsilon_{\perp})) + \\ &+ N \frac{\pi d^2 M_1}{2(M_1 + M_2)w} \int_{r_m(\varepsilon_{\perp})}^{\infty} r_{\perp} U'^2(r_{\perp}) dr_{\perp}, \end{aligned} \quad (29)$$

где первый член в правой части представляет электронный вклад в торможение, а второй — ядерный. Функция $\alpha(w) < 1$ учитывает вес «близких» процессов рассеяния и с ростом энергии уменьшается до 0,5. При аппроксимации вблизи точки поворота $U \sim r_{\perp}^{-\nu}$ ($\nu \approx 1; 2$) интеграл в ядерном члене может быть вычислен и ядерный вклад представлен в виде

$$\left\langle \frac{\Delta E(\varepsilon_{\perp}, w)}{\Delta z} \right\rangle_n = \left(\frac{\Delta E}{\Delta z}(w) \right)_{an} \beta_n, \quad \beta_n = \begin{cases} \frac{\nu \varepsilon_{\perp}^2}{4L_n}, & \varepsilon_{\perp} \leq 2; \\ 1, & \varepsilon_{\perp} > 2. \end{cases} \quad (30)$$

Индексами ae и an помечены характеристики аморфной среды для электронного и ядерного торможения соответственно, причем для электронной тормозной способности достаточно точной является полуэмпирическая формула Готта [12]. Более точные аппроксимации U , используемые ниже, дают и более точные, но громоздкие оценки ядерного торможения, которое играет важную роль для торможения ионов низких энергий.

Третье уравнение в (27) — точное свойство функции Грина:

$$\bar{\varepsilon}_{\perp} = \int_0^{\infty} \varepsilon'_{\perp} G(\varepsilon'_{\perp}, \varepsilon_{\perp}^0, z) d\varepsilon'_{\perp} = \varepsilon_{\perp}^0 + \sigma(z). \quad (31)$$

После определения параметров функции Грина решение исходной задачи находится с помощью квадратуры

$$g(\varepsilon_{\perp}, z) = \int_{E_{ост}}^{E_0} dE \int d\varepsilon_{\perp}^0 g_0(\varepsilon_{\perp}^0, E_0) G(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\perp}^0, E, E_0, z), \quad (32)$$

где g_0 определяется уравнением (9), а $E_{\text{ост}}$ принимается равной минимальной энергии, при которой справедливо приближение бинарности столкновений ион — атом кристалла (~ 1 кэВ). Число «остановившихся» ионов на глубине $z, z + \Delta z$ будет определяться интегралом

$$g_{\text{ост}}(z, E_{\text{ост}}) = \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\perp} \int_0^{E_{\text{ост}}} dE \int d\varepsilon_{\perp}^0 g_0(\varepsilon_{\perp}^0, E_0) G. \quad (33)$$

При численном интегрировании (32) и (33) вклад функции Грина должен быть распространен лишь на положительные значения энергии. Несложно получить также профиль распределения по глубине энергии, переданной кристаллу, в частности найти вклад упругих столкновений с ядрами атомов.

Формула (33) определяет распределение пробегов ионов в кристалле с учетом каналирования с точностью до пробега $R(E_{\text{ост}})$, который достаточно мал по сравнению с полным пробегом $R(E_0)$.

Модель БСП. Введение эффективного потенциала атомного ряда (2), (6) позволяет рассчитать ионную имплантацию с помощью статистического моделирования, рассматривая в качестве элементарного акта взаимодействия рассеяние иона атомной цепочкой кристалла. Для элементарной ячейки двумерной решетки атомных рядов потенциал U_i можно приближенно представить в виде

$$U_i = \begin{cases} U(r_{\perp}), & |r_{\perp} - r_k| \leq r_s < r_0; \\ U_2 = \varepsilon_{\perp 0} + B_x(x - x_{\min})^2 + B_y(y - y_{\min})^2, & |r_{\perp} - r_k| > r_s. \end{cases} \quad (34a)$$

Расстояние r_{\perp} отсчитывается от оси k -й атомной цепочки (r_k); r_s выбирается из условия равенства энергии ε_i значению потенциала на середине расстояния между атомными цепочками. Параболичность потенциала в центре канала обеспечивает постоянную электронную плотность ρ_0 (из уравнения Пуассона) и доступную площадь, линейно растущую с поперечной энергией:

$$A(\varepsilon_{\perp}) = k_1 A_0 \varepsilon_{\perp}. \quad (35)$$

Константу k_1 определим из условия непрерывности доступной площади при $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_t$:

$$k_1 A_0 \varepsilon_t = \pi (r_0^2 - r_m^2(\varepsilon_t)). \quad (36)$$

Решим уравнения движения иона для каждой из областей. Для центральной части канала получим

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \cos \omega_x t + \frac{V_{x0}}{\omega_x} \sin \omega_x t; \\ y(t) &= y_0 \cos \omega_y t + \frac{V_{y0}}{\omega_y} \sin \omega_y t; \end{aligned} \quad (37)$$

$$\omega_{x,y} = \rho_{\omega} \sqrt{B_{x,y}}; \quad \rho_{\omega} = \sqrt{\frac{z_1 z_2 e^2}{M_1 d}}$$

при начальных условиях

$$t = 0, \quad \dot{x} = x_0, \quad y = y_0, \quad V_x = V_{x0}, \quad V_y = V_{y0}.$$

Для области вблизи оси цепочки — круга радиусом r_s — для поперечного движения иона найдем [13]

$$\frac{dr}{dz} = \theta_0 H^{-1}(r, \varepsilon_{\perp}, l); \quad (38a)$$

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{l^2}{r^2} H(r, \varepsilon_{\perp}, l); \quad \varepsilon_{\perp} = \frac{2\theta_0^2}{\psi_1^2}, \quad (38b)$$

где φ — азимутальный угол вращения вокруг оси цепочки; $H = (1 - \tilde{f}(r/a_{TF})/\varepsilon_{\perp} - l^2/r^2)^{-1/2}$; $\tilde{f}(r/a) = 2U/E\psi_1^2$; $\tilde{f} = f(r/a_{TF}) - f(r_0/a_{TF})$; l — причальный параметр столкновения иона с атомной цепочкой; θ_0 — угол (полярный) импульса частицы относительно оси цепочки (при $r > r_0$). Решение уравнений (38а, б) для потенциала Линдхарда (2) или Мольера приводит к вычислительным трудностям. При использовании выражения

$$f(r) = \alpha_0 + (\alpha_1/r) + (\alpha_2/r^2), \quad (39)$$

с константами

$$\alpha_0 = -0,07, \quad \alpha_1 = 0,84a_{TF}, \quad \alpha_2 = 0,60a_{TF}^2, \quad (40)$$

которое с удовлетворительной точностью приближает в смысле наименьших квадратов потенциал Линдхарда в диапазоне (0,5—10) a_{TF} , возможно аналитическое решение для задачи рассеяния атомной цепочкой. Так, угол рассеяния в поперечной плоскости (азимут) получен в виде [14]

$$\varphi = \pi - 2(\Delta\varphi + \varphi_1), \quad (41)$$

где $\varphi_1 = \arcsin(l/r_0)$; $\Delta\varphi$ — угол поворота радиуса-вектора при движении иона из «бесконечности» ($r = r_0$) до точки наибольшего сближения с цепочкой

$$r = r_{mi} = 1/2A_2 [\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 + 4A_2\varepsilon_{\perp}\lambda^2}]. \quad (42)$$

$\Delta\varphi$ определяется выражением

$$\Delta\varphi = \frac{\pi l}{2\lambda} - \frac{l}{\lambda} \operatorname{arctg} \left[\left(\frac{\lambda}{r_0} + \alpha_1(2\varepsilon_{\perp})^{-1} \right) / \left(1 - \frac{l^2}{r_0^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (43)$$

Длина взаимодействия с одной цепочкой

$$s = \frac{1}{\theta_0} \frac{2}{A_2} \left[\frac{\alpha_1}{\sqrt{A_2}} \ln \frac{\sqrt{\varepsilon_{\perp}A_2(1 - l^2/r_0^2)} + A_2r_0 - \alpha_1/2}{\sqrt{\alpha_1^2/4 + A_2(\alpha_2 + \varepsilon_{\perp}l^2)}} + 2\sqrt{\varepsilon_{\perp}(r_0^2 - l^2)} \right]. \quad (44)$$

В формулах (42) — (44)

$$\lambda = \sqrt{l^2 + (\alpha_2/\varepsilon_{\perp})}; \quad A_2 = \varepsilon_{\perp} + (\alpha_1/r_0) + (\alpha_2/r_0^2).$$

Численное моделирование на ЭВМ [15, 16] рассеяния быстрых ионов цепочкой из n ($n \sim 100$) атомов подтвердило высокую точность предлагаемого решения (42) — (44). Таким образом, для идеального случая упругого рассеяния ионов атомной цепочкой имеем «точное» аналитическое решение.

Чтобы учесть неупругие процессы — рассеяние на электронах и ядрах атомов, участвующих в тепловом движении, рассмотрим следующее приближение для траектории:

$$r^2 \simeq r_{mi}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2(r^2)}{dz^2} \Big|_{z=0} \right) z^2. \quad (45)$$

Здесь принято, что $z = 0$ соответствует точке симметрии траектории, где ион максимально приближается к оси атомного ряда, т. е. $r(0) = r_{mi}$, и что в этой точке

$$\frac{dr}{dz}(0) = \frac{d(r^2)}{dz}(0) = 0.$$

Применяя (38а) для вычисления второй производной, получим

$$r^2(z) = r_{mi}^2 + \theta_0^2 K_2 z^2. \quad (46)$$

Численные исследования показали, что достаточно точными являются в поле атомной цепочки для $z_2 \ll a$ выше диффузионные функции (14), а также оценить среднеквадратичный угловой разброс, учитывающий вклад электронного и ядерного рассеяния, и потери энергии в одном столкновении с цепочкой. В модели локальной электронной плотности [1] электронные потери могут быть записаны таким образом:

$$\Delta E_e(\varepsilon_{\perp}, l) = \left(\frac{\Delta E}{\Delta z} \right)_{ae} S m_e; \quad (48)$$

$$m_e = 1/2[1 + aS^*/S]; \quad (49)$$

$$S^* = \frac{1}{N \Delta z_2} \int_{-\infty}^{\infty} J(r(z)) dz. \quad (50)$$

Для потенциала Линдхарда распределение атомных электронов

$$J = J_L(r_{\perp}) = \frac{z_2}{\pi a_{TF}^2} \frac{3}{(3 + r_{\perp}^2/a_{TF}^2)^2}, \quad (51)$$

и для аппроксимации (46), (47) можно провести интегрирование до конца:

$$S^* = S_0 C_1^2 r_0^2 a_{TF}^2 / R_1^3; \quad R_1^2 = r_{ml}^2 + C_1^2 a_{TF}^2; \quad (52)$$

$$C_1^2 = 3 \left(1 + \frac{u_{\perp}^2}{2a_{TF}^2} \right); \quad S_0 = \langle S \rangle = \frac{\pi}{2r_0 \theta_0} (r_0^2 - r_m^2).$$

Через эти же величины выражается и электронное многократное рассеяние

$$\Delta \Omega_e^2(\varepsilon_{\perp}, l) = \left(\frac{\Delta \Omega_e^2}{\Delta z} \right)_a S m_{\Omega_e}; \quad (53)$$

$$m_{\Omega_e} = \frac{1}{2} S^*/S. \quad (54)$$

Вклад ядер в многократное рассеяние получим в виде

$$\Delta \Omega_n^2(\varepsilon_{\perp}, l) = \left(\frac{\Delta \Omega_n^2}{\Delta z} \right)_a S m_{\Omega_n}; \quad (55)$$

$$m_{\Omega_n} = \frac{S_0}{S} \left[\frac{2r_0}{u_{\perp} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{l^2}{u_{\perp}^2}\right) \eta_1 + \eta_2 \frac{3u_{\perp}^2 a_{TF}^2 (p_1 + p_2 + p_3)}{L_n} \right]; \quad (56)$$

$$\left. \begin{aligned} p_1 &= \frac{5}{8} R_c^{-3}; \quad p_2 = \frac{1}{2} (2r_{ml}^2 + 3a_{TF}^2 + 3r_{ml}R_c) / (r_{ml}R_c(r_{ml} + R_c))^{-3}; \\ p_3 &= \frac{1}{4} (11r_{ml}^2 + 24a_{TF}^2 + 9r_{ml}R_c) r_{ml}^{-1} R_c^{-5} (r_{ml} + R_c)^{-3}; \\ R_c &= r_{ml}^2 + 3a_{TF}^2. \end{aligned} \right\} \quad (57)$$

При учете корреляций в тепловых смещениях атомов цепочки в (56) при η_2 появляется корреляционный фактор (17). Передача энергии ядрам кристалла (внутренний интеграл в уравнении (39)) также может быть записана аналитически. Для области центра канала неупругие процессы определяются постоянной электронной плотностью (уравнения (11) — (13)).

Таким образом, нами полностью описано рассеяние иона атомной цепочкой в зависимости от его поперечной энергии и прицельного пара-

метра столкновения с цепочкой. Сравнение этих приближенных аналитических формул с результатами численного моделирования рассеяния потока ионов цепочкой атомов монокристалла [16] показало их достаточную точность.

Для реализации приближения БСЦ необходим блок, описывающий структуру кристалла при переходе от одной цепочки к другой и регулирующий обмен между центральной частью канала и его периферией. Кроме того, на поверхности кристалла необходимо учесть вклад «неполных» столкновений иона с поперечной энергией

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{\perp}^0 + U_t(\mathbf{r}_{in}),$$

\mathbf{r}_{in} — координата входа в элементарной ячейке решетки атомных рядов; ϵ_{\perp}^0 — начальное значение поперечной энергии, определяемое геометрией входа пучка ионов в кристалл, а также угловой расходимостью пучка и окисными и другими аморфными пленками на поверхности монокристалла. Последние из указанных случайных факторов считаются нормально распределенными и вводятся в программу с помощью соответствующего генератора случайных чисел. Аналогично поступим для эффектов неупругого рассеяния, где сумма соответствующих средних квадратов углов многократного рассеяния (53), (55) служит квадратом дисперсии двумерного гауссиана, при этом соответствующий азимутальный угол разыгрывается равномерно на отрезке $[0, 2\pi]$.

Подчеркнем, что при увеличении поперечной энергии среднеквадратичные характеристики потока ионов приближаются к значениям аморфной среды, т. е. $m_E, m_{\Omega_e}, m_{\Omega_e} \rightarrow 1$ в формулах (48), (53), (55), что позволяет транспортировать пучок на большие глубины как в режиме каналирования, так и в стохастическом режиме вплоть до значений энергии, при которых приближение бинарности столкновений с цепочками атомов не справедливо. В этом случае возможен переход к моделям переноса в атомной среде, в частности к моделям бинарных столкновений с атомами, или же ограничимся точностью расчета $\Delta R \sim R(E_{ост})$.

Заключение. Разработанные подходы к описанию ионной имплантации в кристаллы в аналитической формулировке и в модели бинарных столкновений с атомными цепочками эффективно учитывают управляющую роль кристаллической решетки и дополняют друг друга. В частности, расчеты в модели БСЦ показали несправедливость предположений Линдхарда о статистическом равновесии в ряде случаев, что на «большой» глубине кристалла приводит к сложной структуре осевого каналирования [17, 18]. Вместе с тем расчеты, выполненные в аналитическом подходе для расчета выхода обратного резерфордского рассеяния [8], показали хорошее согласие с экспериментальными данными в широком диапазоне температур для каналов и кристаллов разной структуры. Предлагаемые подходы правильно учитывают механизмы потерь энергии, многократное рассеяние на электронах и ядрах кристалла с учетом теплового движения; кроме того, они оптимизированы с точки зрения затрат машинного времени по сравнению, например, с моделью бинарных столкновений с атомами кристалла, давая выигрыш примерно в 30 раз при высоких начальных энергиях ионов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles.— *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 1965, v. 34, N 14.
2. Cho K., Allen W. R., Finstad T. G. e. a. Channeling effect for low energy ion implantation in Si.— *Nucl. Instrum. Methods in Phys. Res.*, 1985, v. B7/8, p. 265—272.
3. Кумахов М. А., Ширмер Г. Атомные столкновения в кристаллах.— М.: Атомиздат, 1980.
4. Schitt H. E., Bonderup E., Andersen J. U. and Esbensen H. Axial dechanneling. I. A theoretical study.— In: *Atomic Collision in Solids*. 2/Dats S., Appleton B. R. and Moak C. D., Eds. N. Y.: Plenum Press, 1973, p. 843—862.

5. Lindhard J. On the properties of a gas of charged particles.— Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 1954, v. 28, N 8.
6. Matsunami N. and Howe L. M. A diffusion calculation of axial dechanneling in Si and Ge.— Radiation Effects, 1980, v. 51, p. 111—126.
7. Самарин В. В. Исследование процессов переноса частиц при осевом каналировании: Автореф. дис. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук.— М.: Изд-во МГУ, 1983.
8. Кадменский А. Г., Самарин В. В. Выход обратного рассеяния ионов при осевом каналировании с учетом торможения.— Поверхность. Физика, химия, механика, 1985, № 5.
9. Kitagawa M., Ohtsuki Y. H. Modified dechanneling theory and diffusion coefficients.— Phys. Rev., 1973, v. 8, p. 3117.
10. Howe L. M., Moore J. A., Matsunami N. and Wright D. R. Axial dechanneling of MeV protons in gold.— Radiation Effects, 1983, v. 70, p. 197—216.
11. Иферов Г. А. Рассеяние протонов с энергией 500 кэВ в тонких монокристаллах золота и кремния: Автореф. дис. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук.— М.: Изд-во МГУ, 1976.
12. Готт Ю. В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях.— М.: Атомиздат, 1978.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика.— М.: Наука, 1973.
14. Кадменский А. Г., Лебедев Н. Ю., Наумова Н. М. и др. Осевое каналирование в толстом монокристалле.— В кн.: Труды XII Всесоюз. совещания по физическому взаимодействию заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во МГУ.
15. Kadmensky A. G., Tulinov A. F. Simulation of particle interaction with atomic chain: angular distributions and nuclear diffusion functions.— In: Proc. VII Int. Conf. on Atom. Collision in Solids/U. V. Bulgakov, A. F. Tulinov, Eds. M.: MSU Publ. House, 1981, p. 52—55.
16. Самарин В. В., Кадменский А. Г. Учет температурной зависимости при описании и моделировании осевого каналирования.— В кн.: Труды XII Всесоюз. совещания по физическому взаимодействию заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во МГУ, 1983.
17. Кадменский А. Г., Лебедев Н. Ю., Наумова Н. М. и др. Исследование режима «двойного каналирования».— В кн.: Труды 14 Всесоюз. совещания по физическому взаимодействию заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во МГУ, 1982.
18. Кадменский А. Г., Лебедев Н. Ю. Исследование динамики осевого каналирования.— В кн.: Труды XIII Всесоюз. совещания по физическому взаимодействию заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во МГУ, 1984.

Поступила в редакцию 25 января 1986 г.

УДК 539.12.04 : 621.315.592 : 548.55

А. Г. КАДМЕНСКИЙ, В. Р. ФАЙЗРАХМАНОВ

(Москва)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОФИЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ ПО ГЛУБИНЕ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Настоящая работа посвящена изложению и иллюстрации применений двух схем статистического моделирования процесса ионной имплантации в приближении бинарных столкновений ионов с атомами мишени (БСА). Первая из представляемых схем описывает эволюцию потока ионов в среде с упорядоченным расположением атомов (БСАК — схема моделирования в кристалле), вторая — в аморфной среде (БСАА). Эти схемы могут рассматриваться как составные части комплекса моделирования ионной имплантации, который должен также включать модели для описания движения частиц в режиме каналирования. Развитый Линдхардом подход эффективных потенциалов [1] для режимов каналирования позволил расщепить фазовое пространство и сформулировать укороченные кинетические уравнения, описывающие поперечное (относительно направления каналирования) движение заряженных частиц. Способы моделирования ионной имплантации на этой основе рассмотрены в работе [2]. Модель БСАК. Модели, явно учитывающие каналирование [2], стал-