

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-

квиваются с трудностями, связанными с существованием в кристалле большого количества различного типа каналов, которые могут заселяться одновременно несколлимированным пучком ионов. От них свободна модель БСАК, но эта степень свободы связана с дополнительными затратами машинного времени.

Отметим, что такого рода модели были созданы раньше открытия эффекта каналирования, поскольку сам он был обнаружен Робинсоном и Оуэном [3] на ЭВМ методом Монте-Карло в модели БСАК. При малых энергиях ионов (≈ 1 кэВ) приближение бинарности столкновений ионов с атомами кристалла не выполняется, и следует использовать модели молекулярной динамики (см., например, [4]). Однако поскольку остаточный пробег иона с такой малой энергией мал по сравнению с полным пробегом (~ 5 нм), в дальнейшем будем использовать модель БСАК, успешно применявшуюся как для расчета распределения пробегов ионов промежуточных энергий в кристалле [3], так и для исследования физики каналирования [5].

Кратко опишем моделирование переноса в приближении бинарных столкновений ионов с атомами. Их взаимодействие описывается универсальным статистическим потенциалом Томаса — Ферми, для которого используем два известных аналитических приближения: Мольера и Линдхарда, хорошо зарекомендовавших себя в широком диапазоне энергий и атомных номеров ионов. Для области «высоких» энергий иона

$$E > 300z_1z_2 \text{ (эВ)}, \quad (1)$$

где z_1 и z_2 — атомные номера иона и атома мишени, можно при вычислении угла рассеяния пользоваться импульсным приближением, когда угол рассеяния (в системе центра масс)

$$\Delta\theta = -\frac{1}{2Mv^2} \frac{d}{dl} \int_{-\infty}^{\infty} V(R = \sqrt{l^2 + z^2}) dz = -U'(l) d/2Mv^2, \quad (2)$$

R — межатомное расстояние; l — прицельный параметр; M — приведенная масса; v — скорость иона до столкновения; d — период кристалла; V и U — потенциалы двухчастичного взаимодействия и атомного ряда соответственно [1]. Простое выражение для угла рассеяния на потенциале Линдхарда получено в его основной работе [1]; для потенциала Мольера

$$V(R) = \frac{z_1z_2e^2}{R} \sum_{i=1}^3 a_i e^{-b_i R/a_{TF}}, \quad (3)$$

где $a_i = \{0,1; 0,55; 0,35\}$; $b_i = \{6,0; 1,2; 0,30\}$, находится более сложное выражение

$$\Delta\theta = \frac{z_1z_2e^2}{Mv^2 a_{TF}} \sum_{i=1}^3 a_i b_i k_1 (b_i l/a_{TF}), \quad (4)$$

здесь e — заряд электрона; a_{TF} — радиус экранирования; k_1 — модифицированная функция Бесселя первого порядка.

Существуют аналитические решения задачи рассеяния для потенциалов вида

$$V \sim 1/R^n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (5)$$

Асимптотические значения угла (обратное рассеяние) вычисляются без учета экранировки для потенциала Кулона ($n = 1$ в (5)). В настоящее время производится сшивка двух асимптотически правильных зависимостей $\Delta\theta(l)$ с помощью введения массива углов рассеяния в зависимости от прицельного параметра. Несложно уточнить эту процедуру, вводя точный угол рассеяния, затабулированный Робинсоном [6], или используя приближение аналитической аппроксимации «временного интеграла» Бирсака [7].

Электронные потери энергии рассеянной частицы зависят от прицельного параметра столкновения (см. [1]):

$$(\Delta E)_e = s_e z_2 N \left((1 - \alpha) \Delta z + \frac{\alpha \int \rho_e(R) dz}{N z_2} \right),$$

где N — плотность мишени; s_e — тормозная способность аморфной среды; $\rho_e(R)$ — электронная плотность; величина α характеризует степень разделения на близкие и далекие столкновения. Последний член в скобках дает при малоугловом рассеянии (для потенциала Мольера)

$$\frac{\alpha}{N} \sum_{i=1}^3 \frac{a_i b_i^2}{a_{TF}^2} k_0(b_i l / a_{TF}),$$

где k_0 — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка. В общем случае потери энергии на возбуждение связанных атомных электронов в феноменологическом подходе Фирсова [8] описываются выражением

$$(\Delta E)_e = \gamma \frac{m_e}{2} \frac{0,7 (z_1 + z_2)^{5/3} V_B v}{[1 + 0,16 (z_1 + z_2)^{1/3} l / a_{TF}]^5},$$

$V_B = e^2 / \hbar$ — скорость Бора; γ — некоторый корректирующий множитель, выбираемый из условия близости к эксперименту; m_e — масса электрона.

В представляемой модели реализованы структуры простой кубической объемно центрированной и гранецентрированной решеток, а также решетки типа алмаза (Si, Ge, алмаз) при поиске очередного рассеивающего центра. Тепловое движение учитывается генерацией псевдослучайных чисел, представляющих распределение гауссовского типа координат N атомов с ковариационной матрицей, определяемой смешанными моментами при учете пространственных корреляций смещений соседних атомов [9].

Для учета дефектов решетки предусмотрена возможность введения блочной структуры кристалла. На поверхности кристалла может находиться тонкий аморфный слой (окисел), который моделируется угловым распределением прошедших ионов с дисперсией, зависящей от толщины.

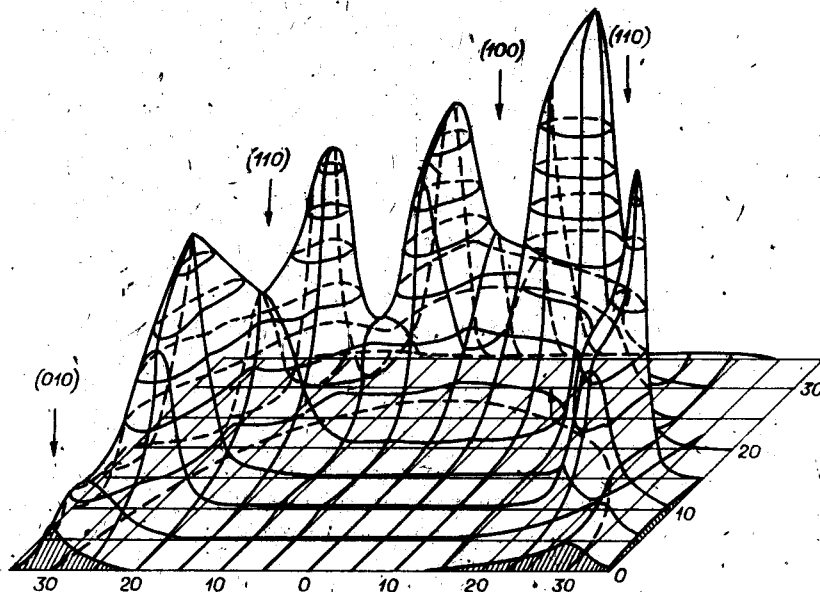
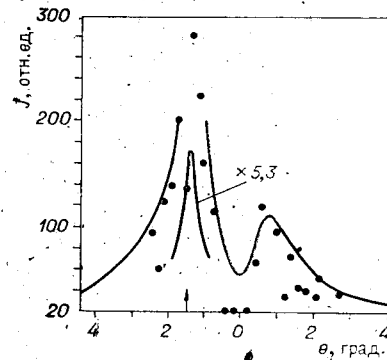


Рис. 1. Угловое распределение протонов за тонким монокристаллом золота $\langle 100 \rangle$ толщиной 42 нм при начальном угле бросания, близком к Ψ_1 (помечен стрелкой) [4]: в центре картины — направление $\langle 100 \rangle$

Рис. 2. Сечение двумерного углового распределения протонов, прошедших кристалл золота толщиной 120 нм при комнатной температуре, плоскостью, проходящей через направление падения пучка на кристалл и ось $\langle 111 \rangle$ (соответствует $\theta = 0$):

точки — результаты расчета; непрерывная кривая — эксперимент [18]



Пучок ионов из ускорителя, падающий на кристалл, равномерно распределен по его поверхности и имеет гауссовское распределение по поперечным импульсам и энергиям.

Реализованная на ЭВМ БЭСМ-6 программа показала высокую эффективность для предсказания угловых распределений частиц, прошедших слой кристалла толщиной ~ 150 нм [9]. Типичные угловые распределения представлены на рис. 1, 2. Обращает на себя внимание особая форма распределений, связанная со структурой моделируемого кристалла, кардинально отличающаяся от гауссообразных распределений в аморфном теле. Полуширины максимумов и сама форма определяются температурой кристалла и таким тонким свойством теплового движения, как скоррелированность тепловых смещений близкорасположенных атомов.

Модель БСАА. В тех случаях, когда рассматривают ионную имплантацию в аморфную мишень или моделируют движение потока в плоскостях, «далеких» от главных кристаллографических направлений и пренебрегают эффектами реканализирования, применима модель бинарных столкновений в аморфном теле.

Длина свободного пробега между столкновениями s определяется полным сечением упругого рассеяния $\sigma(E)$ и разыгрывается в соответствии с выражением

$$\ln \gamma = - \int_0^s dx/\lambda; \quad \lambda = (N\sigma(E))^{-1},$$

λ — средняя длина свободного пробега иона с энергией E ; γ — случайные числа, равномерно распределенные на отрезке $[0, 1]$.

Угол рассеяния находится в процессе моделирования

$$\gamma = \int_{\Theta_{\min}}^{\Theta} d\sigma(\Theta, E)/\sigma(E),$$

где Θ_{\min} — угол обрезания; $d\sigma(\Theta, E)/d\Omega$ — дифференциальное сечение рассеяния в телесный угол $d\Omega$ вблизи полярного угла Θ . Потери энергии иона на длине пробега s задаются выражениями

$$\Delta E_n = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2 \Theta/2;$$

$$\Delta E_e = N \int_0^s s_e(E) ds$$

для упругих n и электронных e процессов соответственно; s_e — электронная тормозная способность среды. При слабой зависимости от энергии $\lambda(E)$ и $s_e(E)$ можно ввести упрощения:

$$\left. \begin{aligned} s &= -\lambda \ln \gamma_1; \\ \Delta E_e &= Nz_2 s s_e(E), \end{aligned} \right\}$$

усреднив тормозную способность по длине s . Значения азимутального угла рассеяния распределены равномерно в диапазоне $[0, 2\pi]$. В конкретных расчетах использовались аналитические аппроксимации [10] полного и

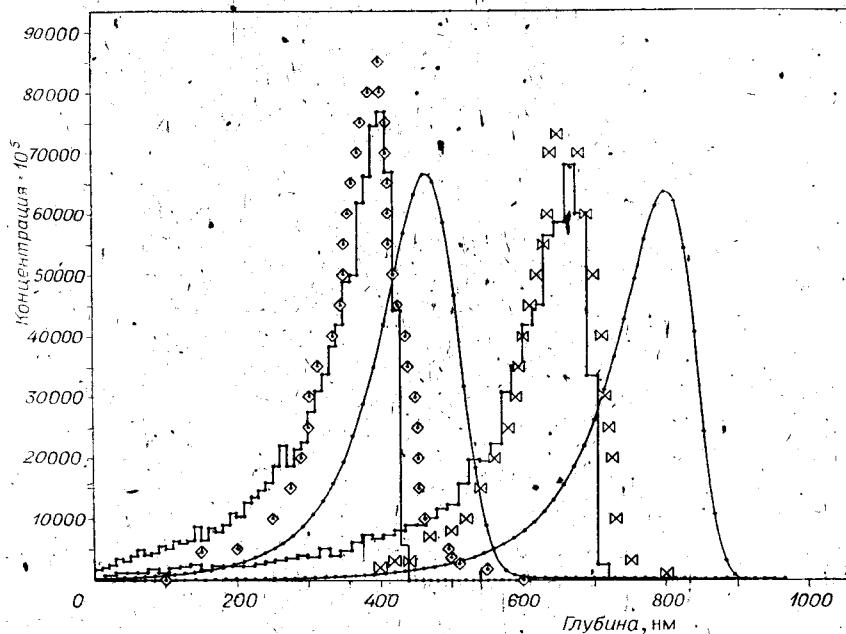


Рис. 3. Профили имплантации водорода ($E = 40, 80$ кэВ, $D = 10^{15}$ ион/см²) в аморфный кремний: маркеры — эксперимент [14]; гистограмма — расчет Монте-Карло; непрерывная линия — распределения Пирсона-4, построенные по моментам работы [16]

дифференциального сечений рассеяния Мольера. Тормозная способность определялась из полуэмпирических таблиц [11, 12].

Следует отметить, что возможна иная схема моделирования рассеяния в аморфной среде, использующая прицельный параметр столкновения и классические траектории (см., например, [13]). В этом случае угол обрезания θ_{min} определяется по максимальному прицельному параметру с помощью специальной процедуры.

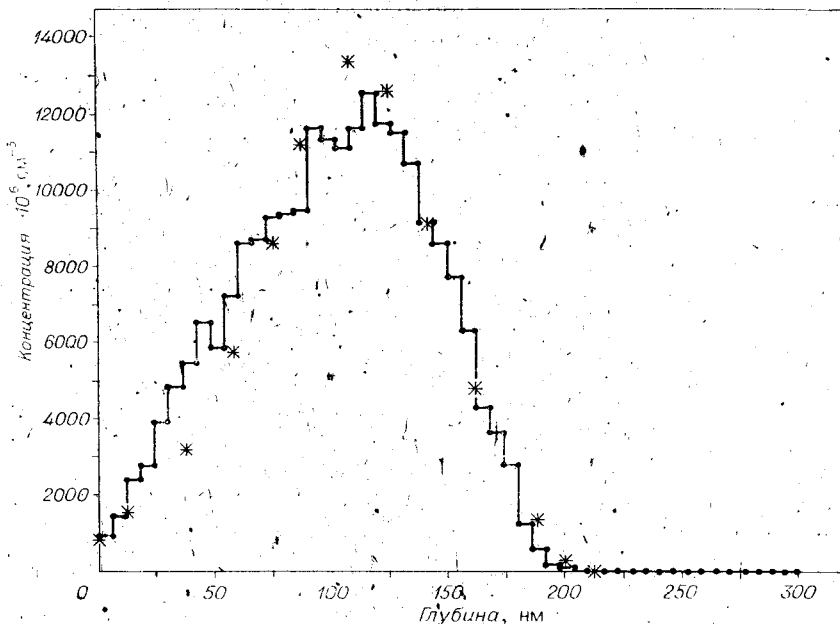


Рис. 4. Профили имплантации бора ($E = 30$ кэВ, $D = 10^{15}$ ион/см²) в аморфный кремний: маркеры — эксперимент [15]; гистограмма — расчет Монте-Карло

В качестве примера работы описанной модели БСАА на рис. 3 и 4 приведены профили распределения остановившихся ($E_{ост} = 1$ кэВ) ионов водорода и бора в кремнии. Расчет представлен вместе с экспериментальными данными из работ [14, 15] для аморфного кремния. Для сравнения на рис. 3 построены две кривые Пирсона-4, использовались значения моментов из [16]. Известные неточности таблиц [11] корректировались введением поправочного множителя. С этим уточнением схема Монте-Карло дает лучшее согласие старших моментов и формы распределения в целом с экспериментальными данными, чем [16], в диапазоне энергий 30—140 кэВ. Следует добавить, что моменты распределения по глубине энергии, переданной в упругих столкновениях, согласуются с предсказаниями теории Брайса [17].

Заключение. Представленные численные модели позволяют находить профиль остановившихся ионов в зависимости от энергии и сорта ионов, а также от структуры мишени и ее тепловых свойств. Дальнейшее развитие этих алгоритмов моделирования требует более точного описания процессов неупругого рассеяния иона, в частности зависимости переданной энергии от прицельного параметра столкновения. Для этого необходим учет оболочечной структуры сталкивающихся ионов и вклада в процессы торможения электронного газа твердого тела.

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. Кадменский А. Г., Лебедев Н. Ю. Перенос ионов в кристалле с учетом каналирования.— *Автометрия*, 1986, № 5.
3. Robinson M. T., Den O. S. Computer Studies of the slowing down of energetic atoms in crystals.— *Phys. Rev.*, 1963, v. 132, p. 2385.
4. Кирсанов В. В., Суворов А. Л., Трушин Ю. В. Процессы радиационного дефектообразования в металлах.— М.: Энергоатомиздат, 1985.
5. Кадменский А. Г., Тулинов А. Ф. Рассеяние протонов цепочкой атомов монокристалла кремния.— В кн.: Труды IV Всесоюз. совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами. М.: МГУ, 1973.
6. Robinson M. T. Tables of classical scattering integrals.— U. S. Atomic Energy Commission Report ORNL-4556, 1970.
7. Biersack I. P., Haggmark L. G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets.— *Nuclear Instruments and Methods*, 1980, v. 174, p. 257.
8. Фирсов О. Б. Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях.— *ЖЭТФ*, 1959, т. 36, с. 1517.
9. Kadmensky A. G., Tulinov A. F. Simulation of particle interactions with atomic chain: angular distributions and nuclear diffusion functions.— In: Proc. of VII Int. Conf. on Atom. Collisions in Solids/U. V. Bulgakov, A. F. Tulinov, Eds. M.: MSU Publ. House, 1980, p. 52.
10. Mueller G. P. Differential cross-section and related integrals for the Molière potential.— *Rad. Eff. Lett.*, 1980, v. 50, p. 87.
11. Andersen H. H., Ziegler I. F. Hydrogen stopping powers and ranges in all elements.— N. Y.: Pergamon Press, 1977.
12. Ziegler I. F. Handbook of stopping cross-sections for energetic ions in all elements.— N. Y.: Pergamon Press, 1980.
13. Бедняков А. А., Жукова Ю. Н., Иферов Г. А. и др. Рассеяние протонов в тонкой аморфной пленке (машинное моделирование).— *Поверхность. Физика, химия, механика*, 1985, № 10.
14. Magee C. W., Wu C. F. Hydrogen ion implantation profiles as determined by SIMS.— *Nuclear Instruments and Methods*, 1978, v. 149, p. 529.
15. Hoiker W. K., Oosthoek D. P., Kreman N. I., De Grefte H. A. M. Concentration profiles of boron implantations in amorphous and polycrystalline silicon.— *Rad. Eff.*, 1975, v. 24, p. 223.
16. Буренков А. Ф., Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А., Темкин М. М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей.— Минск: БГУ, 1980.
17. Brice D. K. Ion implantation range and energy deposition distributions.— N. Y.: Plenum Publ. Corp., 1975, v. 1.
18. Zhukova Yu. N., Iferov G. A., Kadmensky A. G., Iuminov O. A. Some regularities involved in particle interactions with thin single crystals.— In: Proc. of VII Int. Conf. on Atom. Collisions in Solids/U. V. Bulgakov, A. F. Tulinov, Eds. M.: MSU Publ. House, 1980, p. 56.

Поступила в редакцию 25 января 1986 г.