

ПЛОТНОСТЬ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В УСРЕДНЕННОМ ИНДИВИДУАЛЬНОМ КАСКАДЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА

ABSTRACT: A method of calculation of the molecular effect efficiency for diatomic ion bombardment based on analysis of collision density in cascade have been performed in the present work. Molecular effect modeling of Si irradiation with 0.5 MeV/atom Bi^+ and Bi_2^+ ions was provided. The results of the calculation are in a good agreement with experimental data.

В последние годы повышенный интерес проявляется к изучению процессов, происходящих в веществе при облучении молекулярными и кластерными ионами. Изучение взаимодействия кластерных ионов с веществом стимулируется не только научным интересом, но также и практическим потенциалом использования таких ионов в современной микроэлектронике. Действительно, бомбардировка кластерными ионами открывает новые уникальные возможности для модификации и анализа свойств приповерхностных слоёв. В частности, имплантация кластерных ионов позволяет создавать сверхмелкие $p - n$ переходы, используя существующие имплантеры, не рассчитанные на создание пучков медленных ионов. Необходимость в таких переходах диктуется уменьшением размеров элементов интегральных схем, что является основной тенденцией современной микроэлектроники [1]. Кроме того, кластерные ионы могут быть использованы, как для ионного травления и сглаживания поверхности, так и для формирования поверхностных тонких пленок [2].

Бомбардировка полупроводников ускоренными ионами неизбежно приводит к накоплению радиационных дефектов, влияющих практически на все электрофизические свойства. В частности, при достижении в кристалле концентрации вакансий выше определенного порогового значения, ему становится энергетически выгодно перейти из кристаллического состояния в аморфное. Это критическое значение называется порогом аморфизации.

Ход процессов в полупроводниках при облучении атомарными и кластерными ионами может существенно различаться [3-5]. Это явление известно как молекулярный эффект (МЭ). Для описания МЭ необходимо уметь оценивать среднюю долю смещений внутри сложного каскада столкновений, формируемого молекулярным ионом. В течение последних лет для таких баллистических расчетов часто используют TRIM – программу компьютерного моделирования по методу Монте-Карло [6]. Использование данных TRIM, дает возможность получать детальную информацию о параметрах индивидуальных каскадов и о зависимости от глубины расстояний между центрами каскадов столкновений, произведенных атомами, составляющими молекулярный ион. Отсюда может быть рассчитана не только усредненная величина эффективности МЭ, но также и ее глубинное распределение.

Целью данной работы являлась разработка методики получения информации об этих параметрах, характеризующих накопление радиационных повреждений при бомбардировке полупроводников молекулярными ионами. Предложен алгоритм расчета эффективности МЭ для двухатомного иона на основе анализа плотности смещений в каскаде, с использованием выходных данных TRIM:

1. На выходе TRIM имеем координаты всех вакансий, создаваемых в каскаде смещений каждым атомарным ионом. Вакансии каждого иона хранятся в отдельном массиве.
2. Мишень, имеющую в TRIM кубическую форму, разделяем на кубики (размер ребра определяется из соображений оптимальности времени обработки данных при необходимой детализации картины перекрытия каскадов). Устанавливаем порог аморфизации кубика.

3. Случайным образом из набора выбираем несколько каскадов (число каскадов соответствует числу атомов бомбардирующего молекулярного иона).

4. Считаем число кубиков, перешедших в аморфное состояние в случае облучения атомарными и кластерными ионами.

5. Повторяем шаги 3,4, накапливая данные, и усредняем результаты по числу брошенных ионов.

6. Для двухатомного иона величину МЭ можно найти по следующей формуле:

$$\gamma = \frac{k_{am}^{casc}}{2 \times k_{am}^{sing}}$$

где k – число аморфизованных кубиков от кластера и от одного атома соответственно.

Нами было проведено моделирование МЭ в кремнии при облучении ионами Vi^+ и Vi_2^+ с энергиями 0.5МэВ и 1МэВ соответственно. Использована версия TRIM 2006.2, пороговая энергия смещения атома кремния $Ed = 13$ эВ, рассчитано 3500 независимых каскадов ионов Vi^+ . После обработки выходных данных TRIM по предложенному алгоритму (проанализировано 9000 кластерных каскадов) построены зависимости эффективности МЭ от глубины образца для различных значений порога аморфизации (см. рис. 1).

Из рис. 1 видно, что для всех выбранных значений порога аморфизации величина

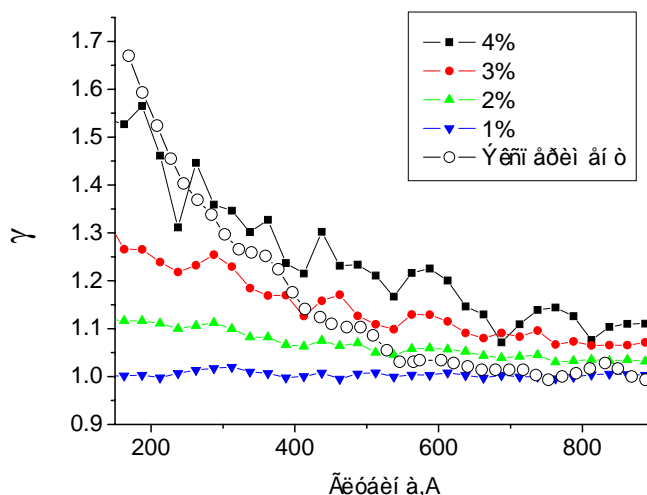


Рис. 1. Расчет эффективности МЭ на основе анализа плотности смещений в каскаде. Облучение кремния 0.5 МэВ Vi^+ и 1 МэВ Vi_2^+ для различных порогов аморфизации (см. вставку)

полученного молекулярного эффекта убывает вглубь мишени. Это вызвано рассеянием атомов, составляющих кластер с ростом глубины, приводящим к уменьшению пространственного перекрытия индивидуальных каскадов смещений. Помимо расчетных, на рис. 1. представлена экспериментальная зависимость величины молекулярного эффекта, взятая из работы [7]. Данные получены при облучении кремния ионами Vi^+ с энергией 0.5 МэВ и Vi_2^+ 1 МэВ при температуре -196°C , плотность потока атомов составляла $6 \cdot 10^9$ атомов/($\text{cm}^2 \cdot \text{c}$).

Видно, что расчетная кривая, полученная для порога аморфизации 4%, неплохо совпадает с экспериментальной зависимостью на глубинах до 40 нм. Однако, с ростом глубины расчетные значения оказываются несколько больше

экспериментальных. Не смотря на это, можно сделать вывод, что алгоритм является вполне адекватным и может быть использован для расчетов (для различных мишеней, а также для различных бомбардирующих ионов).

ЛИТЕРАТУРА:

1. International Technology Roadmap for Semiconductors 2005, <http://public.itrs.net/>.
2. M.Akizuki, J.Matsuo, I.Yamada, M.Harada, S.Ogasawara and A.Do. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B **112** (1996) 83.
3. D.A.Thompson. Rad. Effects **56** (1981) 105.
4. P.Sigmund, I.S.Bitensky, and J.Jensen. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B **112** (1996) 1.
5. A.I.Titov V.S.Belyakov, S.O.Kucheyev. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B **194** (2002) 323.
6. <http://www.srim.org/>.
7. A.I.Titov, S.O.Kucheyev, V.S.Belyakov, A.Yu.Azarov. J. Appl.Phys. **90** (2001) 3867.

