



Белорусский  
государственный  
университет



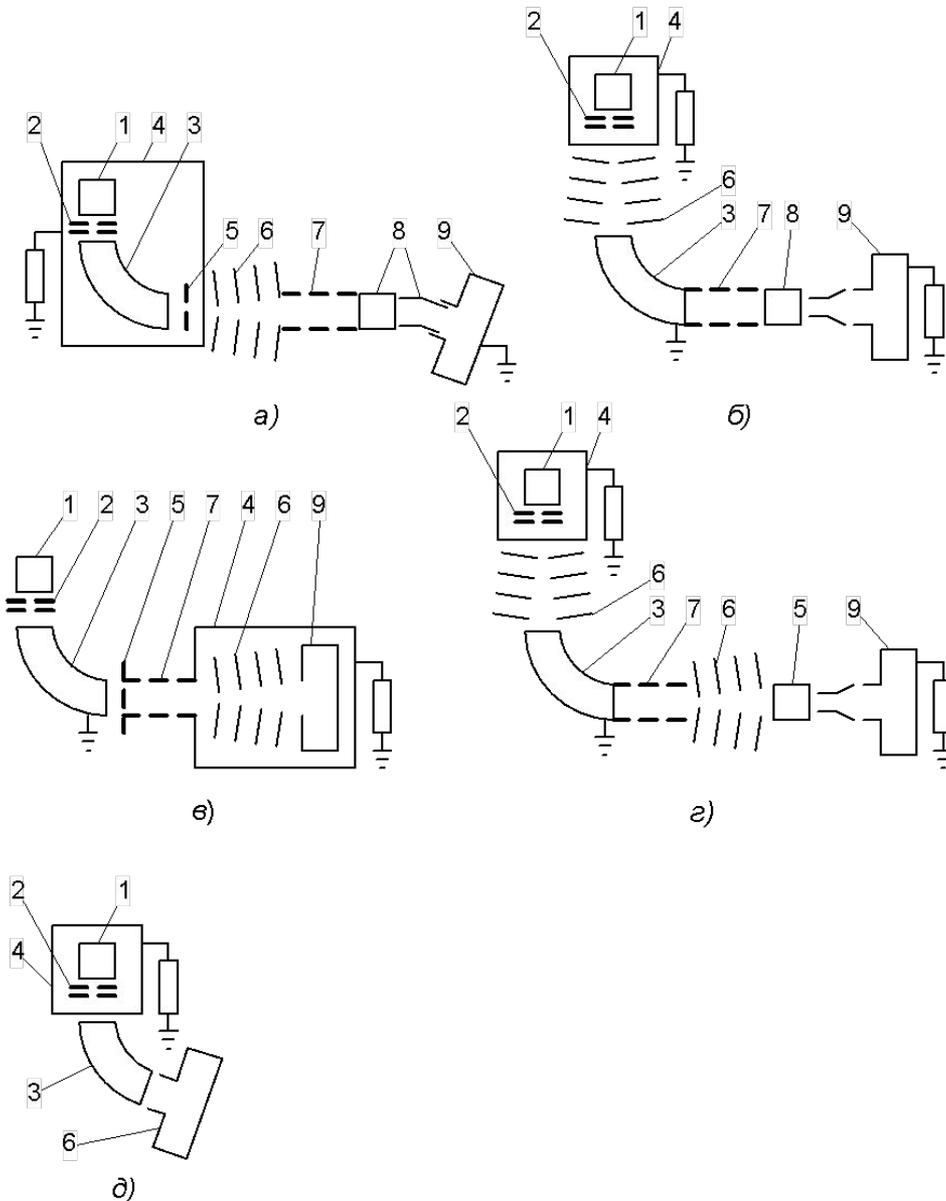
Лаборатория  
элионики

# **ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ЛЕГИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ**

**Комаров Фадей Фадеевич**

д.ф.-м.н., профессор,  
чл.-корр. НАН Беларуси

# 1. Техника ионной имплантации

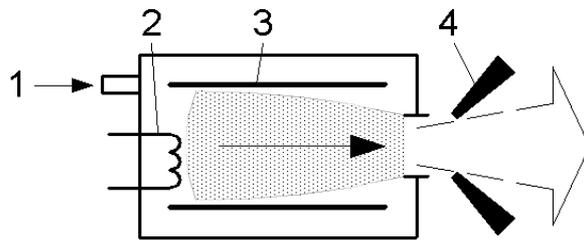


## Компоновки установок ионной имплантации:

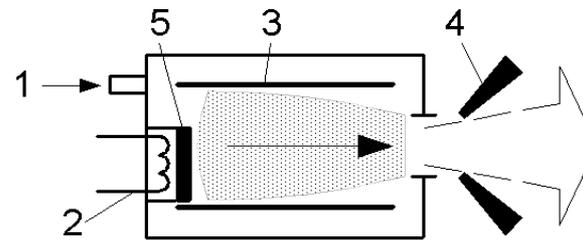
- а)** малых и средних доз;
- б)** с разделением ионов по массам после ускорения;
- в)** сильноточных;
- г)** высокоэнергетических;
- д)** больших доз.

- 1** — источник ионов,
- 2** — система вытягивания и первичного формирования пучка;
- 3** — магнитный масс-сепаратор,
- 4** — высоковольтный модуль,
- 5** — регулируемая диафрагма,
- 6** — система ускорения,
- 7** — фокусирующая линза,
- 8** — пластины электростатического сканирования пучка,
- 9** — приемная камера.

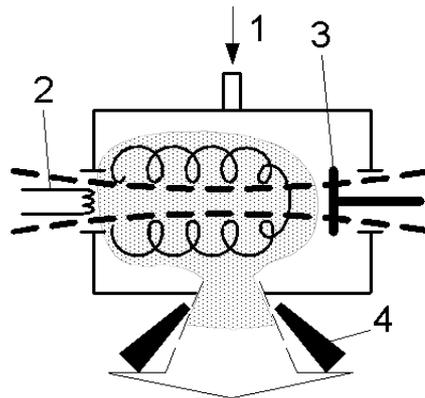
# Источники ионов



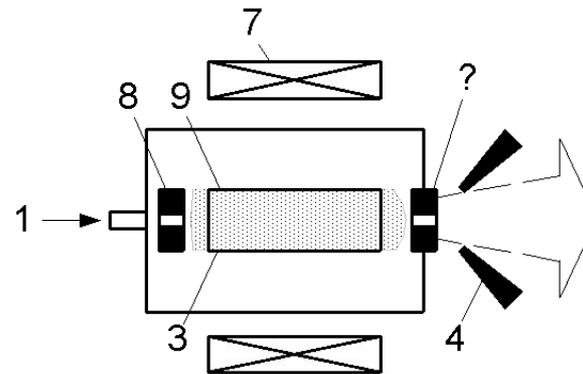
а)



б)



в)

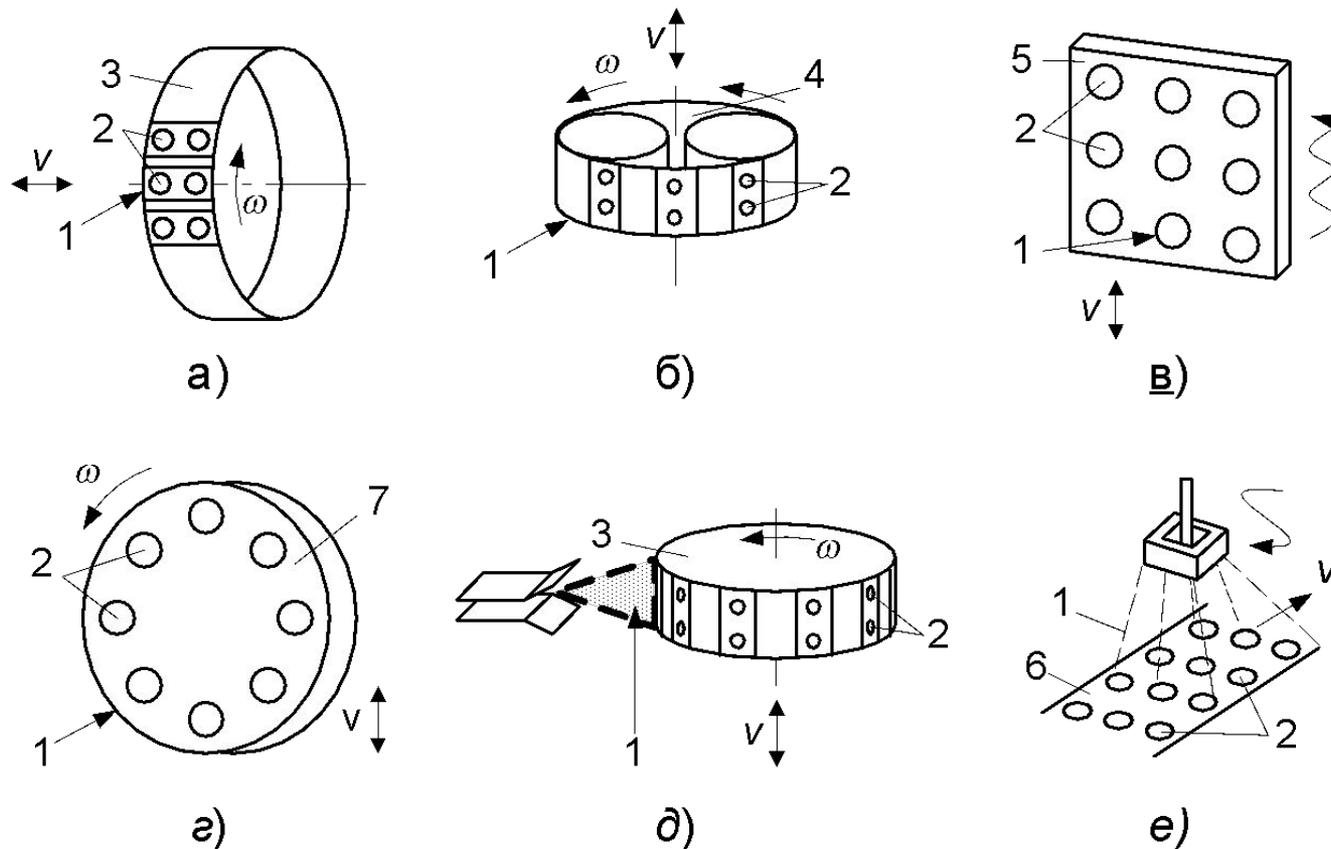


г)

Источники ионов с термокатодом (а, б), с катодами прямого и косвенного нагрева (в) и с холодным катодом (г):

1 — подача газа, 2, 5, 6, 8 — катоды, 3 — анод, 4 — экстрактор, 7 — электромагнит, 9 — плазма

## 2. Системы сканирования ионного пучка



Системы механического (а–г) и комбинированного (д, е) сканирования:  
1 — пучок ионов, 2 — полупроводниковые подложки, 3 — колесо,  
4 — конвейер, 5 — основание, 6 — лента, 7 — диск

### 3. Движение иона в центральном поле

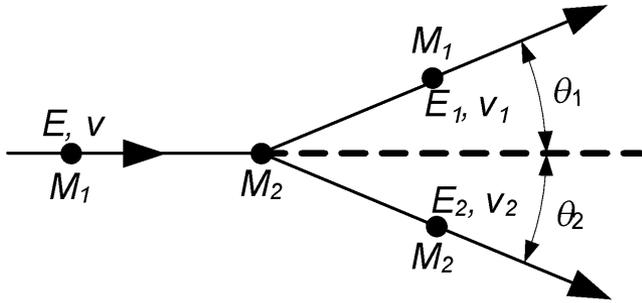


Рис. 3.1. Схема лобового столкновения иона с атомом мишени в лабораторной системе координат

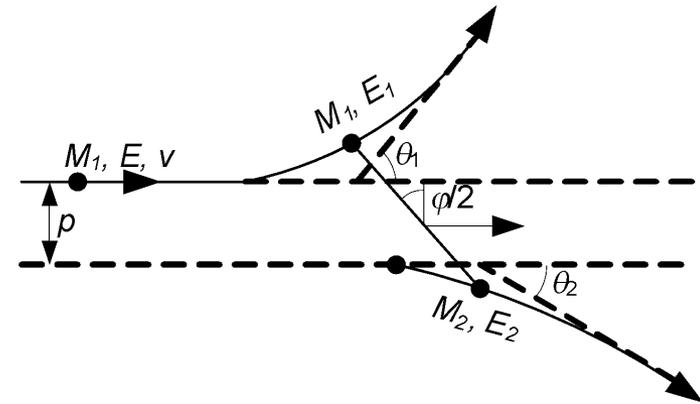


Рис. 3.2. Схема ион-атомного столкновения в ЛСК на прицельном расстоянии  $\rho$

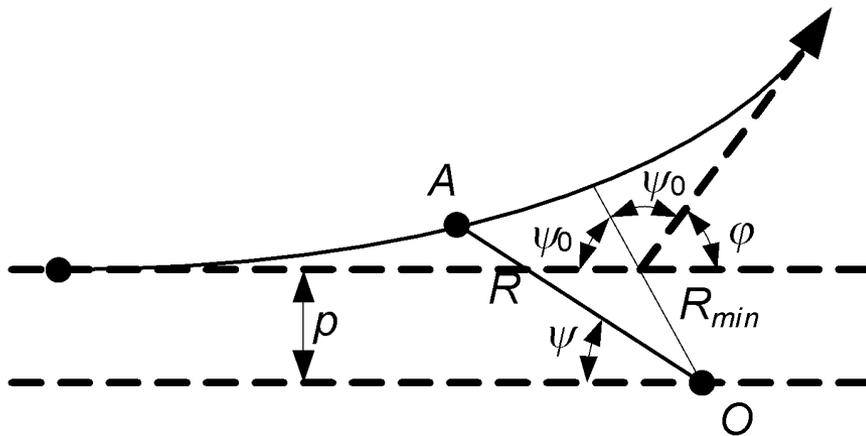


Рис. 3.3. Схема рассеяния иона на рассеивающем центре в системе центра масс

Исходя из законов сохранения энергии и момента количества движения для системы двух частиц, запишем:

$$E_{\text{отн}} = \mu / 2 (\dot{R}^2 + R^2 \dot{\psi}^2) + V(R) = \text{const} \quad (3.1)$$

$$\mu R^2 \dot{\psi} = M = \text{const} \quad (3.2)$$

Здесь  $E_{\text{отн}}$  — относительная энергия движения сталкивающихся частиц.  
Подставим из (3.2) в (3.1)

$$E_{\text{отн}} = \mu \dot{R}^2 / 2 + M^2 / 2\mu R^2 + V(R) \quad (3.3)$$

Отсюда получим

$$\dot{R} = \left\{ (2 / \mu) [E_{\text{отн}} - V(R)] - M^2 / \mu^2 R^2 \right\}^{1/2} \quad (3.4)$$

Так как из (3.2)

$$d\psi/dt = M / \mu R^2 \quad (3.5)$$

то из (3.4) и (3.5) имеем

$$\begin{aligned} dR/dt &= (dR/d\psi)(d\psi/dt) = (dR/d\psi)(M/\mu R^2) = \\ &= \left\{ (2/\mu) [E_{\text{отн}} - V(R)] - M^2/\mu^2 R^2 \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (3.6)$$

И, следовательно, проинтегрировав по  $R$  (т.е. траектории [рис. 3.3](#)) получим

$$\psi = \int MR^{-2} \left\{ 2\mu [E_{\text{отн}} - V(R)] - M^2/R^2 \right\}^{-1/2} dR \quad (3.7)$$

Траектория частицы в поле неподвижного силового центра ([рис. 3.3](#)) симметрична относительно прямой, проведенной в ближайшую к центру точку орбиты (прямые  $OA$ ). Углы между  $OA$  и обеими асимптотами к траектории одинаковы. Если обозначим эти углы  $\psi_0$ , то будет видно, что

$$\varphi = \left| \pi - 2\psi_0 \right| \quad (3.8)$$

Здесь  $\phi$  — угол отклонения частицы в силовом поле. Из (3.7) следует, что

$$\psi_0 = \int_{R_{\min}}^{\infty} MR^{-2} \left\{ 2\mu [E_{\text{отн}} - V(R)] - M^2/R^2 \right\}^{-1/2} dR \quad (3.9)$$

Так как

$$E_{\text{отн}} = \mu v^2/2 = M_2 E / (M_1 + M_2); \quad M = \mu p v \quad (3.10)$$

то

$$\psi_0 = \int_{R_{\min}}^{\infty} pR^{-2} \left[ 1 - p^2/R^2 - V(R)/E_{\text{отн}} \right]^{-1/2} dR \quad (3.11)$$

Здесь  $R_{\min}$  — изображенное на [рис. 3.3](#) минимальное расстояние, на которое частица приближается к рассеивающему центру, причем  $R_{\min}$  — это корень выражения стоящего под знаком радикала в формуле (3.11),  $E$  — энергия налетающей частицы в лабораторной системе координат,  $p$  — параметр удара, (прицельный параметр) — расстояние на котором частица прошла бы мимо рассеивающего центра в отсутствие силового поля,  $v$  — относительная скорость сталкивающихся частиц на “бесконечном” расстоянии друг от друга. Величина  $R_{\min}$  определяется из выражения:

$$\frac{V(R_{\min})}{1 - p^2/R_{\min}^2} = \frac{M_2 E}{M_1 + M_2} \quad (3.12)$$

В (3.12) остается пока не выраженной в явном виде величина потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом мишени. Эту величину называют потенциалом ионно-атомного взаимодействия.

Исходя из законов сохранения энергии и момента количества движения, а также геометрических соображений (рис. 3.1–3.3) можно определить углы отклонения частиц после столкновения по отношению к направлению удара (ЛСК) в лабораторной системе координат  $\theta_1$  и  $\theta_2$  (см. рис. 3.1 и 3.2). Они выражаются через угол в СЦМ системе следующим образом

$$\operatorname{tg} \theta_1 = \frac{M_2 \sin \varphi}{M_1 + M_2 \cos \varphi}, \quad \theta_2 = \frac{\pi - \varphi}{2} \quad (3.13)$$

Для малых углов рассеяния

$$\operatorname{tg} \theta_1 \rightarrow \theta_1 \approx \frac{M_2}{M_1 + M_2} \varphi, \quad \theta_2 \approx \frac{\pi}{2} \quad (3.14)$$

Абсолютные величины скоростей этих частиц, после столкновения можно найти из формул:

$$v_1 = \frac{\left( M_1^2 + M_2^2 + 2M_1M_2 \cos \varphi \right)^{1/2}}{M_1 + M_2} v \quad (3.15)$$

$$v_2 = \frac{2M_1 v}{M_1 + M_2} \sin \frac{\varphi}{2} \quad (3.16)$$

Энергия атома отдачи мишени в ЛСК согласно (3.16) запишется

$$E_2 = \frac{M_2 v_2^2}{2} = \lambda E \sin^2 \frac{\varphi}{2} \quad (3.17)$$

где параметр

$$\lambda = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}$$

определяет максимально возможную передачу энергии (лобовое столкновение), когда

$$E_2^{\max} = \lambda E \quad (3.18)$$

$E_2$  — очень важная величина в физике ионной имплантации и в радиационной физике твердого тела, так как если  $E_2$  в каком-то ионно-атомном столкновении превышает энергию связи атома кристалла в кристаллической решетке, т.е.  $E_2 > E_d$ , то этот атом будет смещен из своего узлового положения. Он станет дефектом структуры, а именно междоузельным атомом.

## 4. Потенциалы ион-атомного взаимодействия

$$V(R) = \frac{z_1 z_2 e^2}{R} \Phi(R/a) \quad (4.13)$$

где  $\Phi$  — функция экранирования для двухатомных систем,  $a$  — длина экранирования по Фирсову

$$a = 0,8853 a_0 / \left( z_1^{1/2} + z_2^{1/2} \right)^{2/3} \quad (4.14)$$

Функцию экранирования  $\Phi$  — Фирсов рассчитывал численно, однако, сейчас имеются и различные аналитические представления ее. Например, Мольер представил функцию экранирования в виде:

$$\Phi(R/a) = \sum_{i=1}^3 C_i e^{-b_i R/a} \quad (4.15)$$

где  $\sum_{i=1}^3 C_i = 1$ ,  $C_1 = 0,35$ ;  $b_1 = 0,3$ ;  $C_2 = 0,55$ ;  $b_2 = 1,2$ ;  $C_3 = 0,1$ ;  $b_3 = 6$

Потенциал (4.13) с функцией экранирования по Мольеру годится для межъядерных расстояний  $R \leq 3a_0$ .

Н. Бор для экранирования рассеивающего поля атомными электронами ввел эмпирический потенциал

$$V(R) = \frac{z_1 z_2 e^2}{R} e^{-R/a} \quad (4.16)$$

где

$$a = a_0 / \left( z_1^{2/3} + z_2^{2/3} \right)^{1/2} \quad (4.17)$$

(годится для  $R \leq a$ ).

При изучении влияния эффекта каналирования на процессы атомного рассеяния в кристаллах, когда вклад близких столкновений сильно подавлен, часто используют потенциал в форме Борна-Майера

$$V(R) = A \exp(-bR) \quad (4.18)$$

Значения  $A$  и  $b$  определяются для каждой пары атомов и интервала значений  $R$  путем подгонки к эксперименту или к имеющимся данным для потенциалов взаимодействия, полученных из точных расчетов. Потенциал (4.18) обычно применяют для описания поведения реальных потенциалов при  $R > a_0$ .

Для приближенных расчетов часто используют аналитические степенные потенциалы

$$V_n(R) = \frac{z_1 z_2 e^2}{R^n} \frac{K_n}{n} a^{n-1} \quad (4.19)$$

где  $n = 1, 2, \dots$ ,  $K_n = \text{const} \approx 1$ . При расчетах столкновений ионов с энергиями в десятки килоэлектронвольт с атомами кристалла удовлетворительные результаты получаются с использованием (4.19) для  $n = 2$ , тогда  $K_2 = 0,831$  (годится для  $a/2 < r < 5a$ ). Иногда применяют также “стандартный” потенциал, предложенный Линдхардом

$$V(R) = \frac{z_1 z_2 e^2}{R} \left( 1 - \frac{1}{(1 + C^2 a^2 / R^2)^{1/2}} \right), \quad (4.20)$$

где  $C^2 = 3$ .

Следует отметить, что потенциалы взаимодействия, полученные на основе атомной модели Томаса-Ферми, дают завышенные значения на больших межъядерных расстояниях. Покажем это на примере системы  $Ar^+ \rightarrow Ar$  (рис. 4.2) ( $x = R/a$ , где  $a$  рассчитывается по Фирсову).

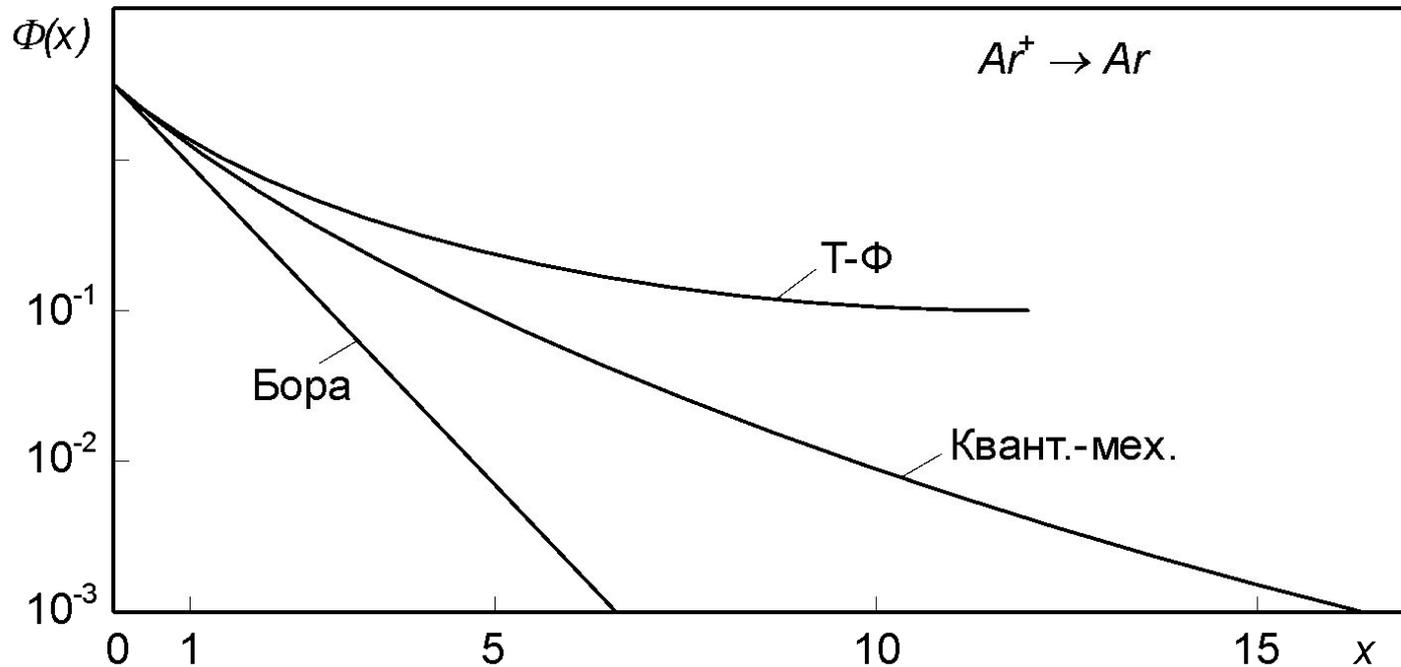


Рис. 4.2. Безразмерная функция экранирования  $\Phi$  для потенциалов ион-атомного взаимодействия в системе  $Ar^+ \rightarrow Ar$  как функция безразмерного расстояния  $x$ .

## 5. Сечения ион-атомного рассеяния

Важной характеристикой процесса ион-атомного рассеяния является дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma$ . Если на рассеивающий центр (атом) подает пучок частиц (ионов) с одинаковыми скоростями  $v$  и  $n$  число частиц, проходящих в 1 с через 1 см<sup>2</sup> сечения однородного пучка, то доля частиц, имеющих прицельное расстояние от  $p$  до  $p + dp$  (относительного рассеивающего центра), определяется следующим образом:

$$dn = 2\pi p dp \cdot n$$

Величина

$$d\sigma = dn/n = d(\pi p^2) = 2\pi p dp \quad (5.1)$$

представляет собой дифференциальное сечение для столкновений с прицельным параметром  $p$ . Выражение (5.1) подразумевает, что в единице объема содержится только один рассеивающий центр.

Так как имеется однозначная связь между  $p$  и  $\phi$ , то частицы, прицельное расстояние для которых заключено между  $p$  и  $p + dp$ , рассеиваются в интервале углов от  $\phi$  до  $\phi + d\phi$ . Дифференциальное сечение рассеяния частицы на угол  $\phi$  запишется

$$d\sigma(\phi) = 2\pi p(\phi) \left| \frac{dp}{d\phi} \right| d\phi \quad (5.2)$$

Относя сечение к элементу телесного угла

$$d\Omega = 2\pi \sin \phi d\phi \quad (5.3)$$

получим

$$d\sigma(\phi) = \frac{p(\phi)}{\sin \phi} \left| \frac{dp}{d\phi} \right| d\Omega \quad (5.4)$$

Учитывая указанную ранее формулу (3.8), а именно

$$\varphi = |\pi - 2\psi_0| \quad (5.5)$$

для степенных потенциалов типа (4.19) может быть получено аналитическое выражение для  $\phi$  согласно (3.11). В этом случае

$$\varphi = \frac{\gamma_n K_n}{\varepsilon} (a/\rho)^n \quad (5.6)$$

где

$$\gamma_n = \frac{1}{2} B\left(\frac{1}{2}, \frac{n+1}{2}\right) \approx \frac{1}{n} \left(\frac{3n-1}{2}\right)^{1/2}; \quad \varepsilon = \frac{a E_{\text{отн}}}{z_1 z_2 e^2}; \quad E_{\text{отн}} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E$$

С учетом (5.6) и (5.4) имеем

$$d\sigma(\varphi) = \text{const } a^2 \varepsilon^{-2/n} \varphi^{-1-2/n} d\varphi \quad (5.7)$$

или заменив  $\phi$  на энергию, полученную атомом отдачи согласно (3.17) и предположив, что  $\phi$  мало, получим

$$d\sigma(E_2) = C E^{-m} E_2^{-1-m} dE_2; \quad m = 1/n \quad (5.8)$$

Постоянная  $C$  определяется как

$$C = \frac{\pi}{2} \lambda'_m a^2 \left( \frac{M_1}{M_2} \right)^m \left( \frac{2z_1 z_2 e^2}{a} \right)^{2m} \quad (5.9)$$

где  $\lambda'_{1/3} = 1,309$ ;  $\lambda'_{1/2} = 0,327$ ;  $\lambda'_1 = 0,5$ . Потенциалы с  $m = 1/3$  могут использоваться для  $\varepsilon \leq 0,02$ ;  $m = 1/2$  для  $0,08 \leq \varepsilon \leq 2$ ;  $m = 1$  (резерфордовское рассеяние) для  $\varepsilon \geq 30$ . Удобно перейти от выражения (5.7) для  $d\sigma$ , как функции двух переменных  $\phi$  и  $\varepsilon$ , к одной переменной  $t = \varepsilon^2 \sin^2 \phi/2 = \varepsilon^2 E_2/E_2^{\max}$ . Такой переход обусловлен тем, что для малых углов рассеяния

$$p = p(\varepsilon\phi) \approx p(t^{1/2})$$

В этом случае запишем

$$d\sigma = \pi a^2 \left( dt / 2t^{3/2} \right) f(t^{1/2}) \quad (5.10)$$

Для потенциалов взаимодействия из модели Томаса-Ферми хорошим приближением является аналитическое представление функции  $f(t^{1/2})$ :

$$f(t^{1/2}) = \lambda' t^{1/6} \left[ 1 + (2\lambda' t^{2/3})^{2/3} \right]^{-3/2} \quad (5.11)$$

где  $\lambda' = 1,309$ . Эта формула удобна для конкретных численных расчетов. Для чисто кулоновского потенциала

$$\operatorname{tg}(\varphi/2) = z_1 z_2 e^2 / \mu p v^2 = b/2\rho \quad (5.12)$$

Здесь  $b = z_1 z_2 e^2 / E_{\text{отн}}$  — расстояние наибольшего сближения при “лобовом” ударе или диаметр соударения. Учитывая (5.12) и (5.4), получим формулу Резерфорда

$$d\sigma_k/d\Omega = z_1^2 z_2^2 e^4 \sin^{-4}(\varphi/2) [2\mu v^2]^{-2} \quad (5.13)$$

Это важная формула для многих задач, в частности, при анализе материалов методом обратного резерфордовского рассеяния.

# Сечения упругого торможения

Поскольку ион, двигаясь в кристалле, может претерпевать столкновение с различными прицельными параметрами относительно атомов мишени  $p$  или передавать атомам мишени различную энергию от  $E_2 = 0$  до  $E_2 = E_2^{\max} = \lambda E$ , то для получения средних потерь энергии на единицу длины пути  $\Delta E/\Delta x$  или  $dE/dx$  или  $\Delta E/\Delta R$  или  $dE/dR$  необходимо провести интегрирование сечения  $d\sigma$  либо по прицельному параметру, либо по переданной энергии

$$\frac{dE}{dR} = N \int E_2 d\sigma = N \int_0^{\infty} E_2(p) 2\pi p dp = N \int_0^{E_2^{\max}} E_2 d\sigma(E_2) \quad (5.1.1)$$

измеряющейся в эВ/нм либо МэВ/см. Здесь  $N$  — число рассеивающих центров (т.е. атомов) в  $1 \text{ см}^3$  тормозящей среды.

Сечение упругого торможения (или иногда называют сечением ядерного торможения) запишется

$$S_n = \frac{1}{N} \frac{dE}{dR} = N \int_0^{E_2^{\max}} E_2 d\sigma \quad (5.1.2)$$

(измеряется обычно в эВ·см<sup>2</sup>/атом).

Учитывая связь  $d\sigma$  с  $E_2$  согласно (5.8) для степенных потенциалов, получим

$$S_n(E) = \frac{1}{1-m} C \lambda'^{1-m} E^{1-2m} \quad (5.1.3)$$

Для обратно-квадратичного потенциала

$$S_n^0(E) = 1,308 \pi a z_1 z_2 e^2 M_1 / (M_1 + M_2) \quad (5.1.4)$$

Этот потенциал дает сечение, не зависящее от энергии ионов.

В литературе часто используется также выражение  $S_n(\varepsilon)$ , которое связано с  $S_n(E)$ . Учитывая (5.10) и (5.11), имеем

$$\frac{dE}{dR} = -N \frac{\pi a^2 E_2^{\max}}{\varepsilon^2} \int d(t^{1/2}) f(t^{1/2}) \quad (5.1.5)$$

Введя безразмерный путь  $\rho$  таким образом, что

$$\rho = N \pi a^2 \lambda R$$

получим:

$$S_n(\varepsilon) = \left( \frac{dE}{dR} \right) (\varepsilon/E) (R/\rho)$$

$$\frac{d\varepsilon}{d\rho} = -N S_n(\varepsilon) = -\int_0^{\infty} d(t^{1/2}) f(t^{1/2}) \quad (5.1.6)$$

$$S_n(E) = 4\pi a z_1 z_2 e^2 M_1 / (M_1 + M_2) S_n(\varepsilon)$$

Для степенных потенциалов получим

$$S_1(\varepsilon) = (2\varepsilon)^{-1} \ln(1,25\varepsilon)$$

$$S_2(\varepsilon) = 0,327; \quad S_3(\varepsilon) = 1,07\varepsilon^{1/3} \quad (5.1.7)$$

Для потенциала Томаса-Ферми

$$S_n(\varepsilon) \approx 1,07\varepsilon^{1/3} / (1 + 1,53\varepsilon^{1/2} + 0,47\varepsilon^{4/3}) \quad (5.1.8)$$

Рис. 5.1 иллюстрирует поведение сечений торможения для различных потенциалов.

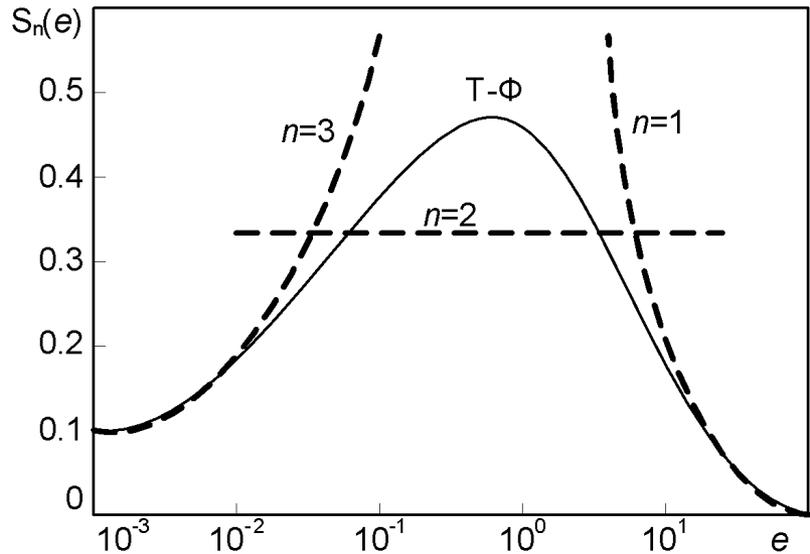


Рис. 5.1. Зависимость безразмерного сечения упругого торможения от приведенной энергии ионов для различных потенциалов ион-атомного взаимодействия

Для  $0,001 \leq \epsilon \leq 10$  — формула Юдина:

$$S_n(\epsilon) = a\epsilon^{1/2} / (b + \epsilon)$$

где  $a = 0,45,$   
 $b = 0,3$

(5.1.10)

Из рис. 5.1 видим области применимости степенных потенциалов.

Для потенциала  $V(R) \sim R^{-3}$ ,  $\epsilon \leq 0,02$ . Для  $V(R) \sim R^{-2}$ ,  $0,08 < \epsilon < 2$ . Для  $V(R) \sim R^{-1}$ ,  $\epsilon \geq 30$ .

## 6. Сечение неупругого торможения

Упругое (или ядерное) торможение доминирует только в области низких скоростей бомбардирующих ионов. С увеличением скорости или энергии ионов растет электронное торможение.

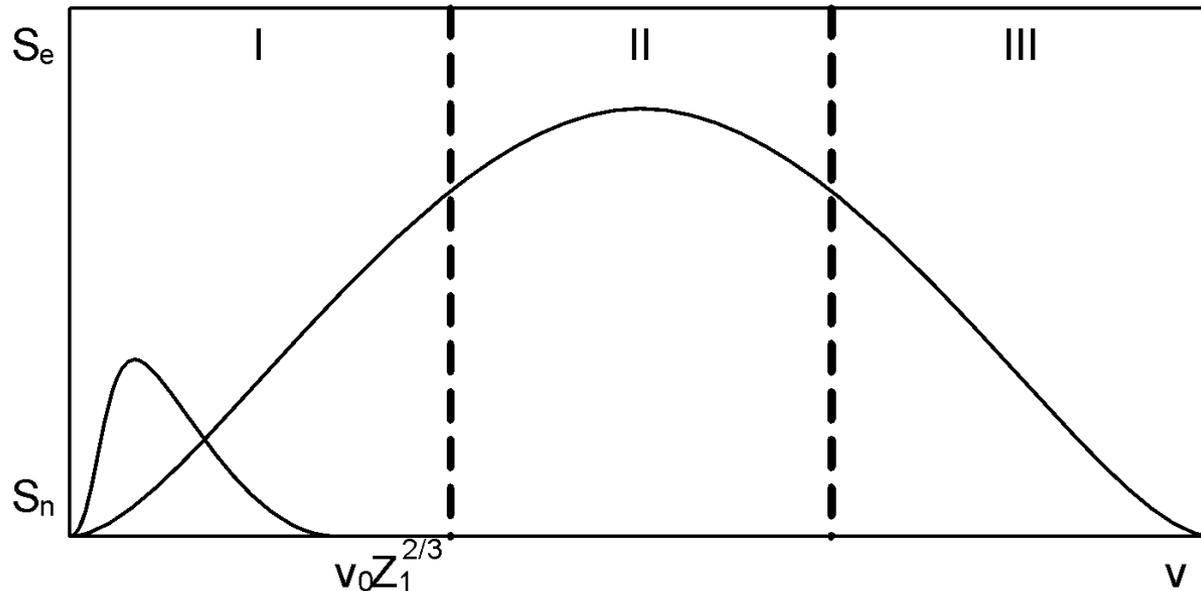


Рис. 6.1. Зависимость сечения электронного торможения от скорости ионов

Существует две теории энергетических потерь медленных тяжелых ионов (обл. I рис. 6.1): Линдхарда-Шарфа и Фирсова.

Согласно Линдхарду-Шарфу

$$S_e = K_e v, \quad (6.1)$$

где

$$K_e = 8\pi a_0 \xi \left[ z_1 z_2 e^2 / \left( z_1^{2/3} + z_2^{2/3} \right)^{3/2} \right] / v_0 \quad (6.2)$$

где  $v_0 = 2,2 \cdot 10^8$  см/с — скорость электрона на первой Боровской орбите атома водорода,  $\xi = z_1^{1/6} \approx 1 \div 2$ . Эта формула с точностью до 20–30% описывает экспериментальные результаты при  $v < u_0 z_1^{2/3}$ .

Несколько иная модель электронного торможения была разработана Фирсовым. В отличие от Линдхарда и Шарфа он считает, что налетающий ион и атом мишени в процессе столкновения образуют квазимолекулу.

$$S_e = \int_0^{\infty} T_e(E, p) 2\pi p dp \quad (6.3)$$

Потеря энергии движущейся частицей 1 в процессе образования квазимолекулы, обусловлена обменом импульсом и энергией с электронами неподвижного до столкновения атома 2. Полная энергия, теряемая частицей 1 при ее движении от  $-\infty$  до  $+\infty$  относительно частицы 2 по Фирсову, приближенно описывается как

$$T_e(E, p) = \Delta E(p) = \frac{0,35(z_1 + z_2)^{5/3} e^2 / a_0}{\left[1 + 0,16(z_1 + z_2)^{1/3} p / a_0\right]^5} \frac{v}{v_0} \quad (6.4)$$

Тогда согласно (6.3) сечение электронного торможения после интегрирования по  $p$  запишется как

$$S_e(v) = 0,234 \pi^2 e^2 a_0 (z_1 + z_2) v / v_0 \quad (6.5)$$

или в удобном для расчетов виде

$$S_e(v) = 2,34 \cdot 10^{-23} (z_1 + z_2) v \text{ ,} \quad (6.6)$$

эВ·см<sup>2</sup>/атом.

Формула Фирсова (6.4) — весьма полезное выражение и для определения потерь энергии каналированных в кристаллах ионов, так как в нем имеется зависимость  $\Delta E$  от прицельного параметра столкновения  $p$ .

Если скорость налетающей частицы существенно выше скорости любого атомного электрона мишени, то неупругие потери энергии описываются квантовомеханической формулой Бете

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi z_1^2 z_2 e^4 N}{mv^2} \ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right) \quad (6.7)$$

здесь  $m$  — масса электрона,  $I$  — средний ионизационный потенциал (более строго — среднее значение энергии возбуждения и ионизации электронов в атомах тормозящей среды).

Простейшее приближение для  $I$  получено в рамках статистической модели атома Томаса-Ферми:

$$I \approx 13,6 z_2, \text{ эВ.} \quad (6.8)$$

При более низких скоростях тяжелый ион будет содержать определенное число связанных с ядром электронов и средний заряд иона будет  $z_{1\text{eff}} < z_1$ . Тогда в формуле для торможения (6.7)  $z_1^2$  следует заменить на  $z_{1\text{eff}}^2$ .

В самом грубом приближении, как мы уже сказали, связанными с ядром иона остаются в твердом теле только электроны, скорость которых больше скорости иона. Скорость электронов на любой электронной оболочке можно оценить из выражения

$$\frac{mv_i^2}{2} = E_{\text{св}i} \quad (6.10)$$

где  $v_i$  — скорость электронов  $i$ -ой оболочки,  $E_{\text{св}i}$  — энергия связи таких электронов с ядром. Более строгие расчеты с учетом эффектов обдирки и захвата электронов в тормозящей среде получены в работе Бетца

$$z_{1\text{eff}} = z_1 \left[ 1 - C^* \exp\left(-z_1^{-\gamma} v/v_0\right) \right] \quad (6.11)$$

здесь  $C^* = 1,034$ ;  $\gamma = 0,688$ .

# 7. Пробеги ионов. Профили распределения ионов и выделенной энергии

Одной из важных характеристик, определяющих судьбу ускоренного иона, внедряемого в твердое тело, является его пробег, т.е. тот путь, который он проходит до остановки. Для рассмотрения распределений ионов по пробегам рассмотрим основные положения, закладываемые во многие теоретические модели.

- 1) Вещество, с которым взаимодействует ускоренный ион является изотропным и однородным, атомы в нем располагаются хаотически, т.е. мишени аморфны;
- 2) Упругие и неупругие взаимодействия происходят независимо друг от друга, тогда

$$d\sigma = d\sigma_e + d\sigma_n \quad (7.1)$$

- 3) Упругие и неупругие потери энергии рассматриваются на основе статистической модели атома Томаса-Ферми;
- 4) Считается, что упругие взаимодействия можно рассматривать как парные, не учитывая изменения состояния внешних электронов в твердых телах и зарядовое состояние ионов;
- 5) Потери энергии в каждом акте соударения предполагаются много меньшими чем энергия иона, что позволяет использовать статистический подход к рассмотрению пробегов.

Если сечение электронного и ядерного торможения известны, то суммарные потери энергии на единицу длины запишутся:

$$dE/dR = N[S_n(E) + S_e(E)] \quad (7.2)$$

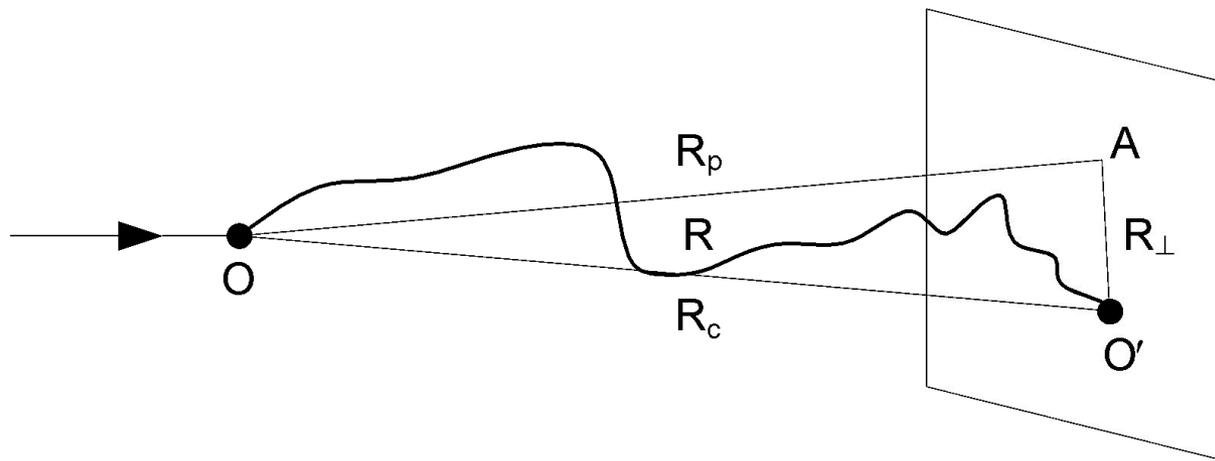
Проинтегрировав (7.2) по энергии, получим

$$R = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (7.3)$$

где  $R$  — средняя общая длина пути частицы с начальной энергией  $E$  в твердом теле.

Траектория каждого иона в твердом теле представляет собой сложную кривую (рис. 7.1).

Большое число остановившихся в мишени ионов будет определять распределение внедренных атомов по глубине мишени и в поперечных направлениях.



*Рис. 7.1.* Связь между траекторным пробегом  $R$ , проецированным пробегом  $R_p$ , поперечным (литеральным) пробегом  $R_{\perp}$  и векторным пробегом  $R_c$ .  $O$  и  $O'$  — точки входа и остановки иона в твердом теле, соответственно.

В настоящее время наиболее плодотворными для описания распределения внедренных атомов являются два теоретических подхода:

- а) метод статистических испытаний Монте-Карло и
- б) численные методы решения уравнения переноса Больцмана.

С помощью первого метода моделируются на ЭВМ: траектории нескольких тысяч или десятков тысяч ионов, атомов отдачи, образование радиационных повреждений.



Самая известная программа для моделирования транспортных задач методом Монте-Карло — программа Бирзака — TRIM (в 1991 г. переименована в SRIM).

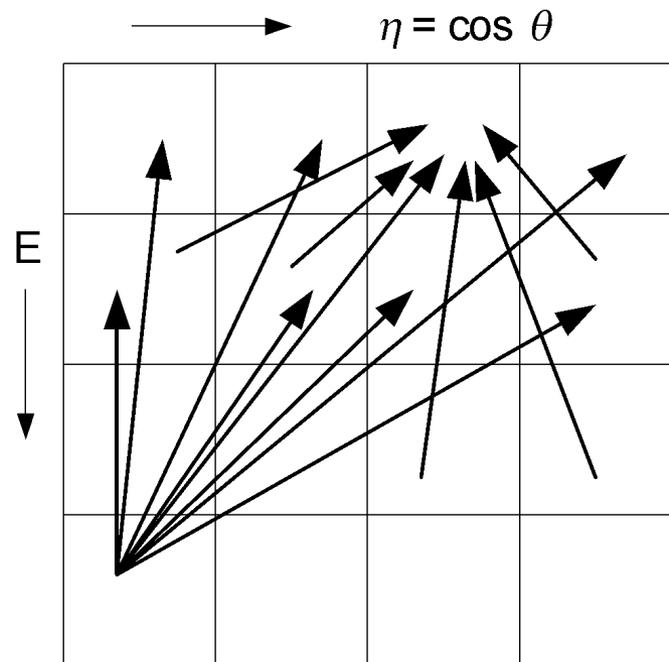
В рамках второго подхода исследуется процесс переноса внедряемых и выбитых из узлов кристалла атомов в каскадной модели на основе изучения баланса в вероятности столкновений. В качестве балансового уравнения получается уравнение Больцмана, описывающее процесс переноса ионов, атомов отдачи, выделенной энергии в упругих и неупругих столкновениях (т.е. на ядерное и электронное торможение радиационных дефектов и др.) Уравнение баланса:

$$\frac{\partial F(E, \eta, x)}{\partial x} = N \left[ \int \frac{F(E', \eta', x)}{\eta'} d\sigma(E', \eta' \rightarrow E, \eta) - \int \frac{F(E, \eta, x)}{\eta} d\sigma(E, \eta \rightarrow E', \eta') \right] - N \frac{S_e}{\eta} \frac{\partial F(E, \eta, x)}{\partial E},$$

$F$  — функция распределения ионов на глубине  $x$  по энергиям и углам,  $\eta = \cos \theta$ .

Рис. 7.2 иллюстрирует разбиение по сетке энергий и углов. Обычно используется 20–100 разбиений по энергии и 5–20 разбиений по углу  $\eta$ , а также разбиение модифицируемой приповерхностной области кристалла на 20–50 слоев. Распределения частиц по ячейкам энергии и угла относительно направления падения рассматриваются последовательно на каждом слое, начиная от самого поверхностного. Какая-то часть частиц в каждом слое может быть рассеяна на углы, близкие к  $180^\circ$ . В этом случае необходимо рассматривать и поток в обратном направлении, и возможность части его частиц быть повернутыми при последующих столкновениях снова вперед.

*Рис. 7.2.* Схема численных расчетов функции распределения ионов  $F(E, \eta, x)$  по углам  $\theta$  и энергии  $E$ .



## 8. Метод моментов распределений

Исходя из уравнения Больцмана, Линдхард с сотрудниками получил уравнение переноса для  $F(E, R_n)$  — вероятности того, что ион, влетающий в мишень с энергией  $E$ , имеет пробег вдоль траектории между  $R_n$  и  $R_n + dR_n$ , т.е. для распределения полных пробегов

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_R(E, R_n)}{\partial R_n} = N \left[ \int_0^{E_{2\max}} d\sigma_n(E_2, E) \{ F_R(E - E_2, R_n) - F_R(E, R_n) \} - \right. \\ \left. - NS_e(E) \frac{\partial F_R(E, R_n)}{\partial E} \right] \end{aligned} \quad (8.1)$$

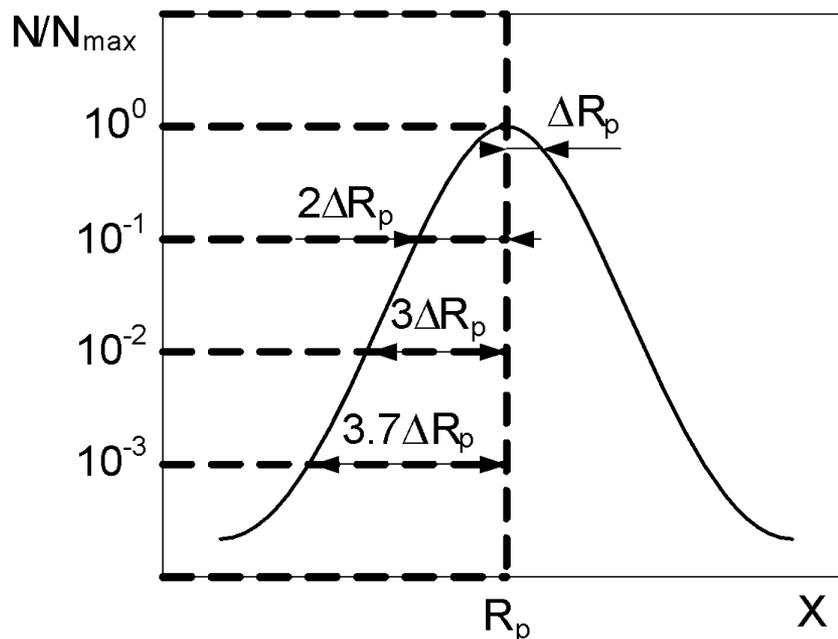
Это уравнение решается численно только, положив  $S_e = 0$  и для  $V(R) \sim R^{-2}$  или  $V(R) \sim R^{-n}$ . Момент  $m$ -го порядка рассматриваемого распределения определяется как

$$\langle R^m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} R^m F_R(E, R_n) dR_n \quad (8.2)$$

В качестве функции распределения ионов по глубине  $x$  мишени выбиралось гауссово распределение

$$N(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \quad (8.3)$$

где  $D$  — интегральная доза облучения (ион/см<sup>2</sup>), иногда называют флюенс, на единицу площади мишени. Для такой функции значение  $x = R_p$  соответствует максимальной концентрации введенной примеси



$$N_{\max} = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \quad (8.4)$$

Рис. 8.1. Распределение Гаусса  $N(x)$  для имплантированных атомов.

Концентрация убывает: в два раза на глубине  $x \approx R_p \pm 1,2\Delta R_p$ ; в десять раз  $x \approx R_p \pm 2\Delta R_p$ ,  $\Delta R_p$  равна ширине гауссова распределения на его полувысоте, деленной на  $2(2 \ln 2)^{1/2}$ . Когда

$$x = R_p \pm \Delta R_p; \quad N(x) = e^{-1/2} N_{\max}$$

Если облучение мишени проводится хорошо сфокусированным пучком под углом  $\phi$  относительно нормали к образцу,

$$N(x) = \frac{D \cos \phi}{\sqrt{2\pi \Delta x}} \exp \left[ - \left( x - R_p \cos \phi \right)^2 / (2\Delta x^2) \right] \quad (8.5)$$

В этом случае среднеквадратичный разброс глубин проникновения ионов  $\Delta x$  не совпадает со среднеквадратичным разбросом проецированных пробегов  $\Delta R_p$ , а зависит от поперечного разброса  $\Delta Y$  (или  $\Delta R_{\perp}$ )

$$\Delta x^2 = \Delta R_p^2 \cos^2 \phi + \Delta Y^2 \sin^2 \phi \quad (8.6)$$

Однако, во многих экспериментальных работах показан асимметричный (не гауссовый) вид распределений внедренных атомов. Поэтому для описания профилей внедренных атомов нами использована асимметричная функция распределения Пирсона 4-го типа.

Расчеты первых четырех моментов распределений  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $Sk$  и  $\beta_2$  выполнялись для функций распределения внедренных атомов, а также распределения по глубине мишени энергии ионов, выделенной в упругих столкновениях (смещение атомов из узлов решетки), и энергии, выделенной на возбуждение и ионизацию электронов тормозящей среды. Эти функции распределения для трех процессов обозначаются соответственно:

$$F_R(r, n, E), F_D(r, n, E) \text{ и } F_I(r, n, E) \quad (8.8)$$

Интегралы от вводимых функций по всему пространству задают их нормировку и поясняют их физический смысл. Функция распределения по пробегаем ионам нормируется на единицу с тем, чтобы значение

$$F_R(r) d^3r$$

интерпретировалось как вероятность остановки иона в окрестности точки  $r$  (в (8.8) вектор  $n$  характеризует направление движения иона,  $E$  — энергия иона):

$$\int F_R(r, n, E) d^3r = 1 \quad (8.9)$$

Интеграл от функции распределения упруго выделенной энергии (или “дефектов”) по пространственной переменной равен общему количеству энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений на упругие столкновения:

$$\int F_D(r, n, E) d^3r = \nu(E) \quad (8.10)$$

Функция распределения ионизаций  $F_I(\overset{\boxtimes}{r}, \overset{\boxtimes}{n}, E)$  нормируется на общее количество энергии, выделенной в электронную подсистему

$$\int F_I(\overset{\boxtimes}{r}, \overset{\boxtimes}{n}, E) d^3\overset{\boxtimes}{r} = \eta(E) \quad (8.11)$$

Сумма выделенных энергий должна равняться полной начальной энергии иона  $E$ , поэтому

$$\eta(E) + \nu(E) = E \quad (8.12)$$

Как показано ранее, для упрощения расчетов уравнений типа (8.1) удобно рассматривать моменты в сферической системе координат:

$$\langle x^i y^j z^k \rangle = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} F(r, \eta', \varphi) X^i Y^j Z^k r^2 dr d\eta' d\varphi \quad (8.13)$$

где  $\eta'$  — косинус угла между направлением влета ионов в мишень и направлением на рассматриваемую точку  $\overset{\boxtimes}{r}$ .

В наших таблицах параметров (моментов) пространственного распределения ионов и выделенной энергии (изданных в 1980 и 1985 гг.) рассчитаны пространственные моменты распределений.

Пространственные моменты относительно оси  $X$  могут рассматриваться как параметры, характеризующие распределение по глубине. Так  $\langle X \rangle$  — это средняя глубина проникновения ионов в направлении пучка, т.е. средний проективный пробег  $R_p$ . Если в (8.13) усреднение проводится по  $F_D(r)$  или  $F_I(r)$ , то  $\langle X \rangle$  — это средняя глубина энерговыделения в упругих или соответственно в неупругих соударениях.

Соответствующие величины будем обозначать  $R_{p_D}$  и  $R_{p_I}$  — по аналогии со средним проективным пробегом.

Моменты второго порядка непосредственно связаны со среднеквадратичными разбросами величин в продольном и поперечном направлениях. Так, среднеквадратичный разброс пробегов определяется как:

$$\Delta R_p = \left\langle (X - \langle X \rangle)^2 \right\rangle^{1/2} = \left( \langle X^2 \rangle^{1/2} - \langle X \rangle^2 \right)^{1/2} \quad (8.14)$$

а среднеквадратичный разброс пробегов в поперечном направлении

$$\Delta Y = \left\langle (Y - \langle Y \rangle)^2 \right\rangle^{1/2} = \langle Y^2 \rangle^{1/2} \quad (8.15)$$

Из-за цилиндрической симметрии нечетные степени  $\langle Y \rangle$  при усреднении дают 0.

Момент третьего порядка по  $X$  связан с продольной асимметрией распределения:

$$Sk = \langle (X - R_p)^3 \rangle / \Delta R_p^3 = \left( \langle X^3 \rangle - 3 \langle X^2 \rangle R_p + 2R_p^3 \right) / \Delta R_p^3 \quad (8.16)$$

Смешанный момент третьего порядка типа  $\langle X Y^2 \rangle$  определяет смешанную асимметрию

$$Sk_y = \langle (X - R_p) Y^2 \rangle / \Delta R_p \Delta Y^2 = \left( \langle XY^2 \rangle - R_p \Delta Y^2 \right) / \Delta R_p \Delta Y^2 \quad (8.17)$$

Этот параметр определяет насколько скореллировано изменение поперечного разброса пробегов с изменением глубины. Так, если в распределении среднеквадратичный разброс в поперечном направлении не зависит от глубины, то  $Sk_y = 0$ . Смешанная асимметрия, таким образом, определяет форму двух и трехмерных распределений, например, при локальной ионной имплантации.

Момент четвертого порядка по продольной координате  $x$  определяет эксцесс глубинного распределения

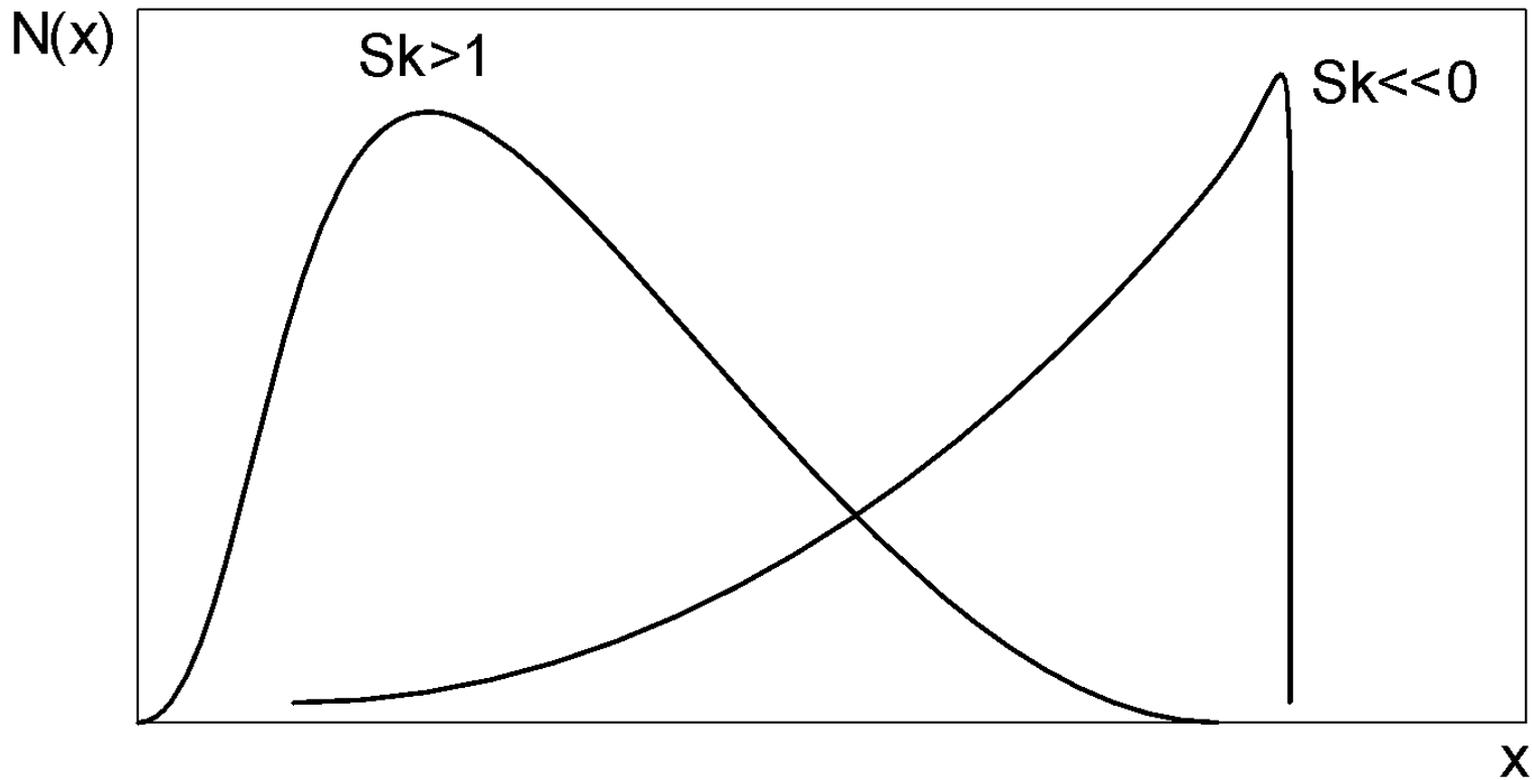
$$\beta_2 = \left\langle \left( X - R_p \right)^4 \right\rangle / \Delta R_p^4 = \left( \langle X^4 \rangle - 4R_p \langle X^3 \rangle + 6R_p^2 \langle X^2 \rangle - 3R_p^4 \right) / \Delta R_p^4 \quad (8.18)$$

Для построения двух- и трехмерных распределений иногда необходимо введение смешанного эксцесса:

$$\begin{aligned} \beta_{xy} &= \left\langle \left( X - R_p \right)^2 Y^2 \right\rangle / \Delta R_p^2 \Delta Y^2 = \\ &= \left( \langle X^2 Y^2 \rangle - 2 \langle X Y^2 \rangle R_p + \Delta Y^2 R_p^2 \right) / \Delta R_p^2 \Delta Y^2 \end{aligned} \quad (8.19)$$

Эксцесс, равный трем, характерен для распределения Гаусса. Более острые распределения имеют больший эксцесс, а распределение с более плоской вершиной, но резко спадающие — меньший эксцесс.

Заметим, что при асимметричных распределениях  $R_p$  не совпадает с модальным пробегом, т.е. с расстоянием от поверхности до максимума функции  $N(x)$ . Асимметрия  $Sk = 0$  соответствует симметричному распределению Гаусса.



*Рис. 8.2.* Схематическое представление функций распределения Пирсона для различных значений асимметрии  $Sk$

Для построения таких асимметричных профилей в наших работах применена функция Пирсона 4-го типа:

$$F^g(x) = K \left[ 1 + (x/a^*)^2 \right]^{-q} \exp \left[ -v^* \operatorname{arctg}(x/a^*) \right] \quad (8.20)$$

Здесь  $K$  — нормирующий множитель, а величины  $a^*$ ,  $q$ ,  $v^*$  рассчитываются через рассмотренные выше моменты функций распределения.

Имеются аналитические выражения для параметров  $a^*$ ,  $q$  и  $v^*$  в зависимости от  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $Sk$ .

Тогда профиль концентрации внедренных атомов может быть легко рассчитан по формуле

$$N(x) = 10^{\bar{n}} \frac{D}{\Delta R_p \sqrt{2\pi}} F(X) \quad (8.21)$$

Здесь, как и ранее,  $D$  — доза внедряемых ионов, ион/см<sup>2</sup>. Концентрация примеси выразится в атомах на сантиметр кубический, если  $\Delta R_p$  задано в нанометрах. Значение  $F^{\text{II}}(X)$  берется из наших таблиц. В формуле (8.21) в аргументе функции Пирсона  $F^{\text{II}}$  стоит безразмерная переменная

$$X = (x - R_p) / \Delta R_p$$

Профиль распределения выделенной в упругих соударениях энергии (профиль радиационной поврежденности) также можно построить на основе распределения Пирсона:

$$F_D(x) = 10^{\hat{\alpha}} \frac{\nu(E)}{\Delta R_{pD} \sqrt{2\pi}} F(X), \quad (8.22)$$

где  $\nu(E)$  — энергия, выделенная в упругих соударениях, кэВ,  $\Delta R_{pD}$  — среднеквадратичный разброс по глубине распределения упруго выделенной энергии, нм. Величина  $F_D(x)$  в (8.22) выражена в электрон-вольтах на нанометр.

Профиль первичных радиационных повреждений получим, разделив  $F_D(x)$  на удвоенную энергию смещения  $E_d$  атома мишени из узла решетки. Для кремния  $E_d \approx 10\text{--}15$  эВ (обычно считают  $E_d = 14$  эВ)

$$n_D(x) = 10^7 D / (2E_d) F_D(x) \quad (8.23)$$

Формула (8.23) выражает концентрацию первичных радиационных нарушений — пар Френкеля (вакансия + межузельный атом) в  $1 \text{ см}^3$  в зависимости от глубины без учета их последующей диффузии, аннигиляции на стоках и рекомбинации друг с другом.

Сравнивая средние глубины залегания примеси  $R_p$  со средней глубиной радиационно-поврежденного слоя  $R_{pD}$  при ионной имплантации (см. таблицы), видим, что глубина залегания радиационных повреждений приблизительно на 30–40% меньше, чем средний проективный пробег ионов.

Ввиду того, что области внедрения примеси и радиационных повреждений пространственно разделены  $R_{pD}/R_p \approx 0,6–0,75$  при энергии ионов  $E = 20–300$  кэВ, имплантацию примеси можно производить сквозь защитный слой оксида или фоторезиста таким образом, чтобы область радиационных повреждений локализовалась в его пределах, а легирующая примесь располагалась в рабочей области полупроводникового прибора.

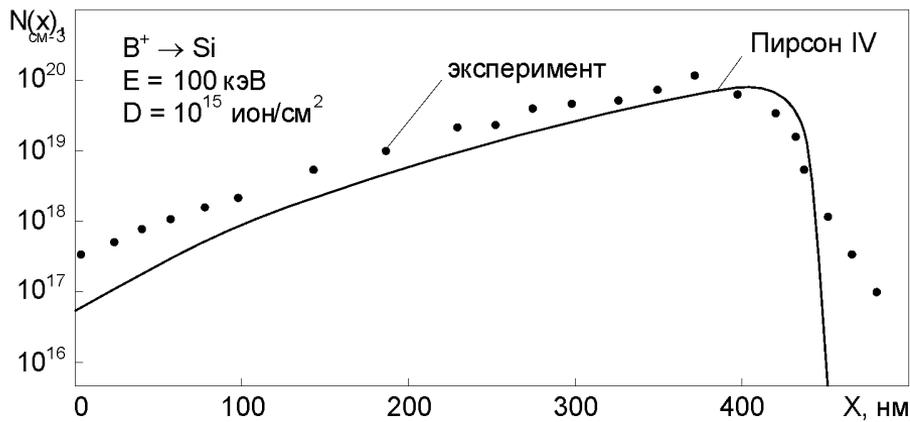


Рис. 8.3. Распределение атомов бора  $N(x)$ , внедренных в кремний при  $E = 100 \text{ кэВ}$  и  $D = 10^{15} \text{ см}^{-2}$

Рис. 8.4. Распределение атомов сурьмы  $N(x)$ , внедренных в кремний при  $E = 100 \text{ кэВ}$  и  $D = 10^{16} \text{ см}^{-2}$

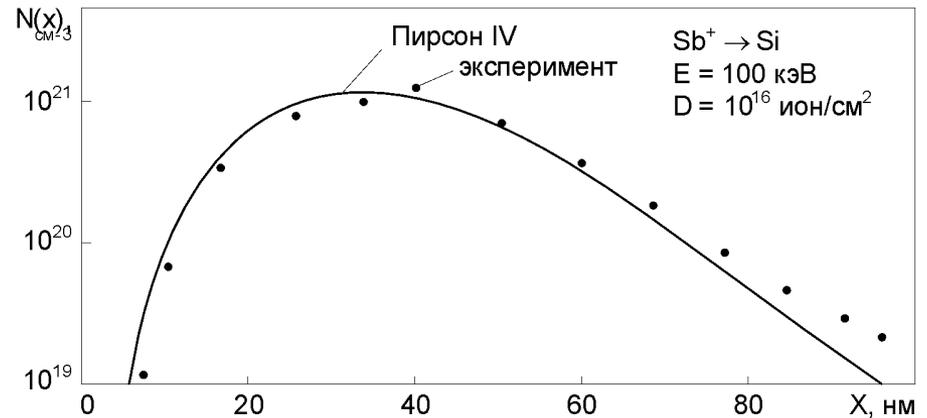
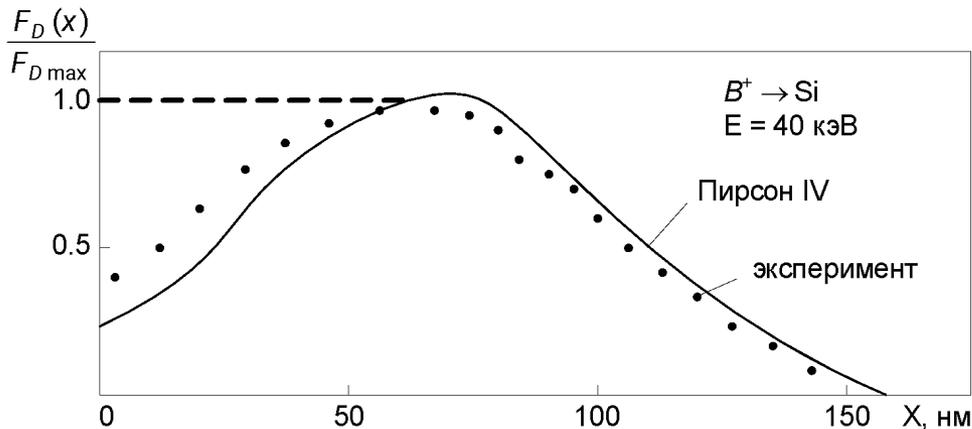


Рис. 8.5. Нормированное распределение упруго-выделенной энергии по глубине кристалла кремния при облучении его ионами бора с  $E = 40 \text{ кэВ}$



# 12. Каналирование ионов в кристаллах

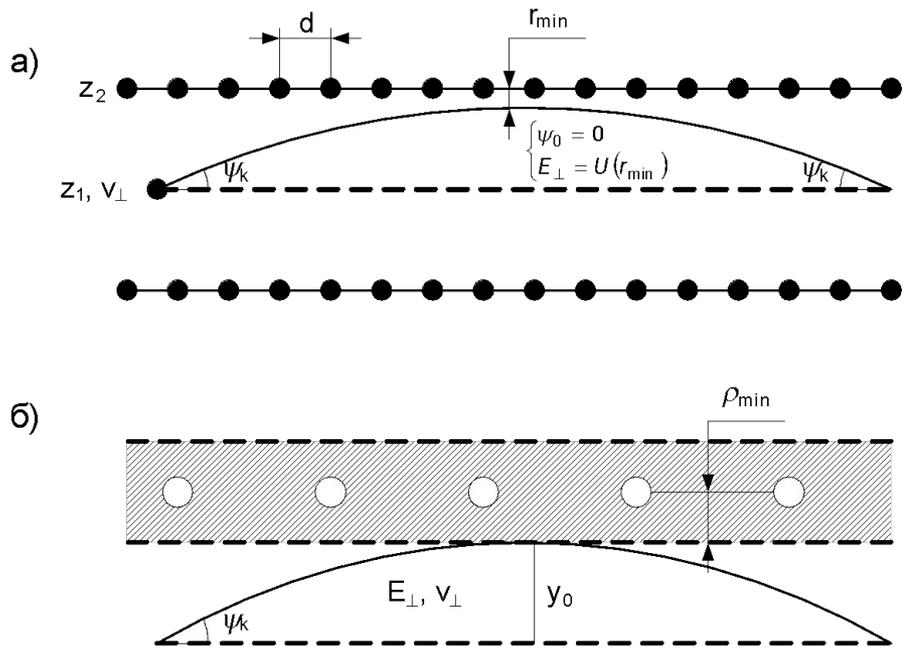


Рис. 12.1. Схематическая диаграмма процессов рассеяния ионов:  
 а) в аксиальном канале;  
 б) в плоскостном канале

Усредненный непрерывный потенциал, действующий на частицы на расстоянии  $r$  от атомной цепочки, запишется как

$$U(r) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} V(z^2 + r^2)^{1/2} dz \approx \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} V(z^2 + r^2)^{1/2} dz \quad (12.1)$$

где  $d$  — расстояние между атомами в атомной цепочке,  $z$  — измеряется в направлении цепочек, определяющих геометрию аксиального канала,  $V(R)$  — потенциал межатомного взаимодействия.

С учетом стандартного потенциала Линдхарда (4.20) для  $V(R)$  непрерывный потенциал цепочки примет вид:

$$U(r) \approx \frac{z_1 z_2 e^2}{d} \ln \left[ \left( \frac{\sqrt{3a}}{r} \right)^2 + 1 \right] \quad (12.2)$$

где  $a$  — параметр экранирования.

Для плоскости непрерывный потенциал определяется как

$$U(y) = 2\pi N d_{\text{пл}} \int_0^{\infty} r V(r^2 + y^2)^{1/2} dr \quad (12.3)$$

Тогда для межатомного потенциала (4.20) будем иметь

$$U(y) = 2\pi z_1 z_2 e^2 N d_{\text{пл}} \left[ (y^2 + 3a^2)^{1/2} - y \right] \quad (12.4)$$

где  $d_{\text{пл}}$  — межплоскостное расстояние,  $N_{\text{пл}} = N d_{\text{пл}}$  — плотность атомов в атомной плоскости.

Приравнивая теперь  $E_{\perp}$  к потенциалу  $U(R)$  или  $U(y)$ , можно рассчитать минимальное расстояние  $r_{\min}$  или  $\rho_{\min}$ , на которое ион приближается к атомной цепочке (плоскости)

$$E_{\perp} = U(r_{\min}) \quad \text{или} \quad E_{\perp} = U(\rho_{\min}) \quad (12.5)$$

В случае аксиального каналирования частица не преодолеет потенциальный барьер, создаваемый цепочкой, и не покинет канал, если выполняется условие

$$r_{\min} \geq d(v_{\perp}/v_{\parallel}) = d \operatorname{tg} \psi \approx d \psi \quad (12.6)$$

Подставив (12.6) в (12.5), получим выражение для критического угла каналирования:

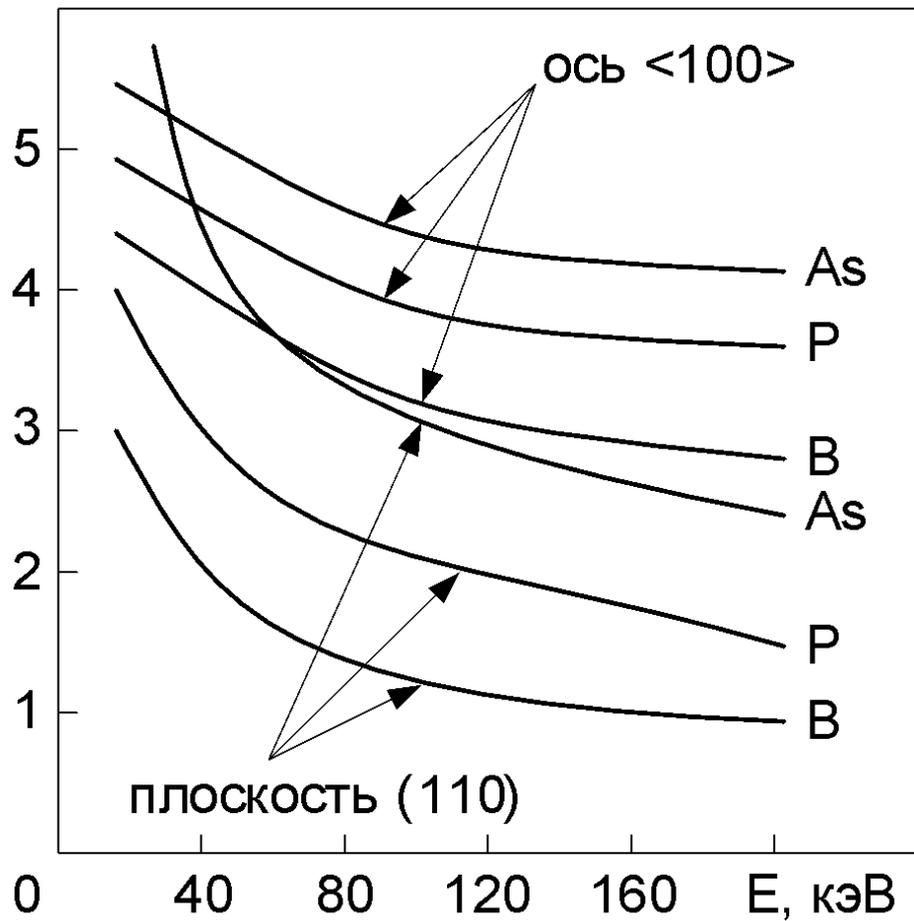
$$\psi_K = \begin{cases} \left( \frac{2z_1 z_2 e^2}{dE} \right)^{1/2}; & E > \frac{2z_1 z_2 e^2 d}{a^2}; \\ \left( \frac{3}{2} \right)^{1/4} \left( \frac{a}{d} \right)^{1/2} \left( \frac{2z_1 z_2 e^2}{dE} \right)^{1/4}; & E < \frac{2z_1 z_2 e^2 d}{a^2}. \end{cases} \quad (12.7)$$

Аналогично при плоскостном каналировании получим

$$\psi_K = \left( \frac{2\pi N d_{\text{пл}} z_1 z_2 e^2 a}{E} \right)^{1/2} \quad (12.8)$$

Величина  $\psi_K$  зависит от энергии ионов и атомных номеров  $z_1$  и  $z_2$ . Для средних энергий ионов (десятки-сотни килоэлектронвольт) величина  $\psi_K$  обычно не превышает нескольких градусов (рис. 12.2). Наблюдается резкий рост критических углов для низких энергий и тяжелых ионов. Критические углы для аксиального и плоскостного каналирования сравнимы по величине при  $E < 30$  кэВ.

$\psi_K$ , градусы



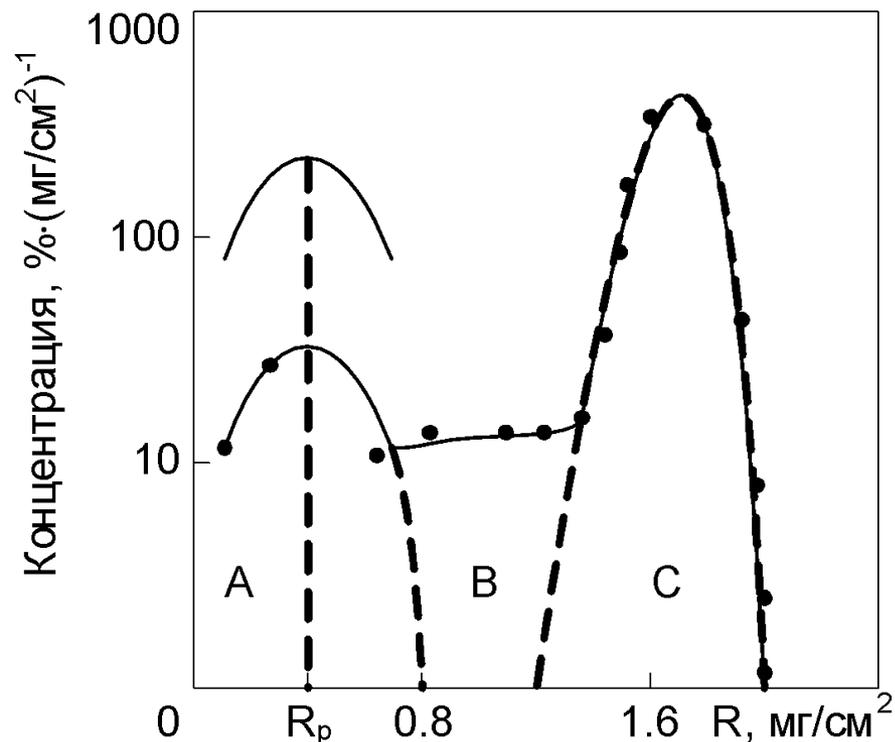
*Рис. 12.2.* Теоретические критические углы для каналирования ионов  $B$ ,  $P$  и  $As$  в кремнии,  $\psi_K(E)$ .

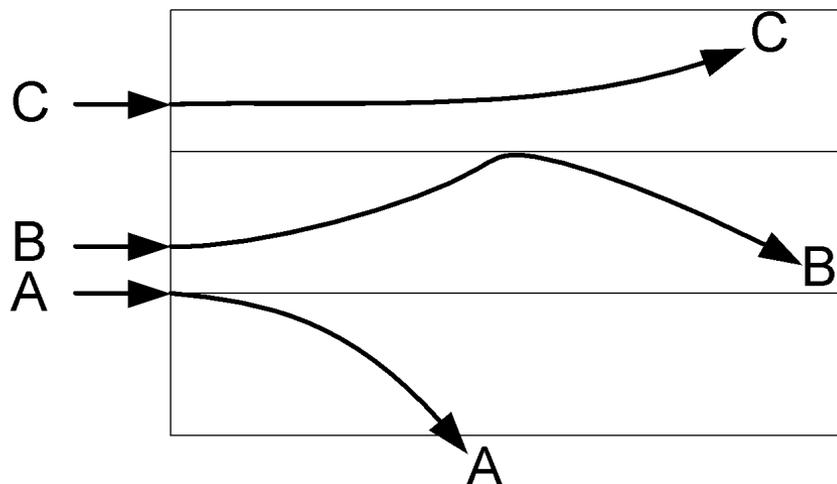
Учитывая, что  $S_e(E)$  пропорционально  $E^{1/2}$ , и торможение каналированных ионов определяется взаимодействием с электронами кристалла, имеем

$$R_{\max} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_e(E)} = \frac{2E}{NS_e(E)} = AE^{1/2} \quad (12.9)$$

Наиболее сильно эффект каналирования проявляется в материалах, которые характеризуются малыми амплитудами тепловых колебаний атомов, например, в вольфраме. Следовательно, деканалирование частиц будет слабым (рис. 12.3).

Рис. 12.3. Распределение по пробегам ионов  $^{42}\text{K}^+$ , внедренных в кристалл вольфрама при  $25^\circ\text{C}$  вдоль  $\langle 111 \rangle$ -канала,  $E = 50$  кэВ;  $1 \text{ мг/см}^2$  соответствует  $0,52 \text{ мкм}$ .





*Рис. 12.4.* Траектории ионов при аксиальном каналировании в зависимости от положения точки входа иона относительно атомных цепочек.

В этом случае на кривой концентрационного распределения ясно выражены три участка, которые соответствуют трем типам траекторий. К группе **A** относятся частицы, рассеянные на углы  $\psi > \psi_K$  при вхождении в кристалл. Их пробеги приблизительно соответствуют случаю аморфной мишени. Частицы группы **B**, имеющие большие амплитуды осцилляций в каналах, при постепенном увеличении поперечной энергии деканализируют на отрезке глубины между двумя основными максимумами. В эту группу вносят вклад также реканализированные (захваченные в каналы из хаотического компонента) ионы. Схематическое поведение траекторий ионов изображено на [рис. 12.4](#). Группе **C** соответствуют частицы, движущиеся в каналах почти до полной остановки.

В кремнии амплитуды тепловых колебаний атомов значительно превышают амплитуды, характерные кристаллам вольфрама. Это приводит к большему деканалированию ионов и менее выраженному второму пику в распределениях концентрации внедренных атомов. Распределение ионов существенно зависит от формы и размера каналов, что иллюстрирует [рис. 12.5](#) для кристаллов кремния.

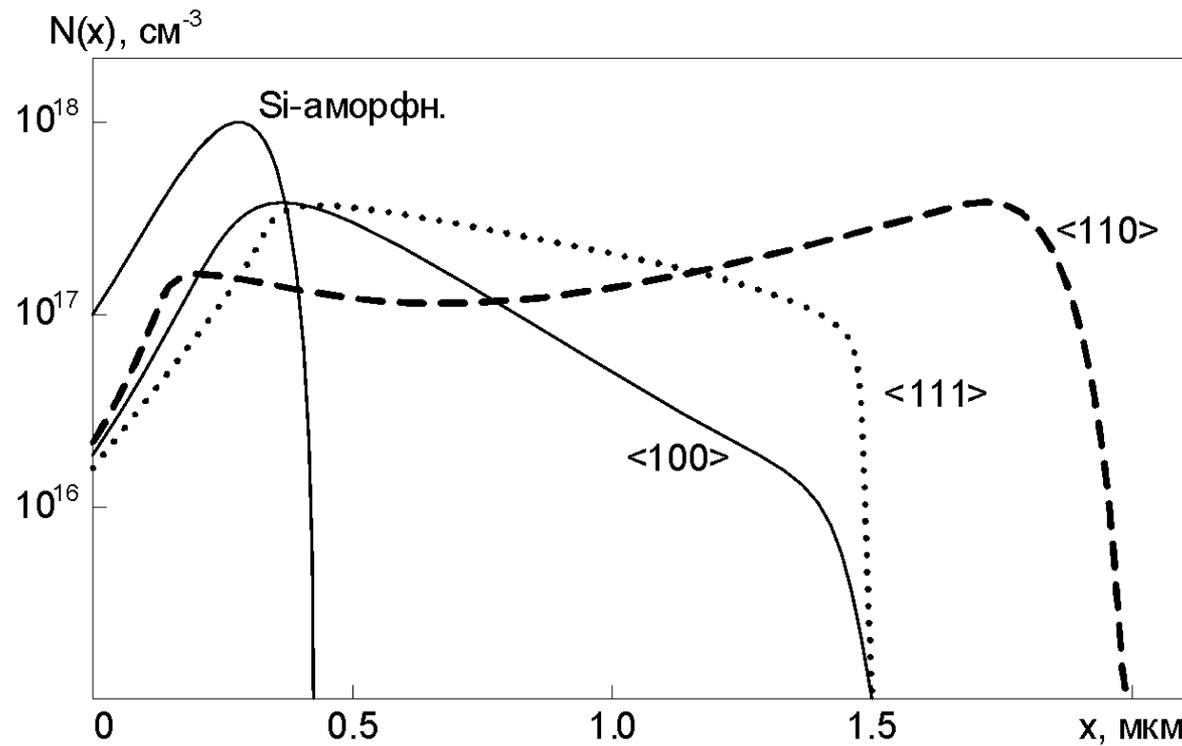


Рис. 12.5. Влияние ориентации кристалла кремния к пучку на концентрационные профили примеси при внедрении ионов  $P^+$ ,  $E = 200$  кэВ,  $D = 3 \cdot 10^{13}$   $\text{см}^{-2}$ .

# 13. Имплантация высоких доз ионов

Изменение формы профиля с увеличением дозы ионов можно легко проследить теоретически при наложении определенных начальных условий: отсутствует селективное (избирательное) распыление атомов матрицы или внедренных атомов, не учитывается эффект атомов отдачи, радиационное распухание вещества мишени считается пренебрежимо малым, форма профиля близка к гауссовой, отсутствует диффузия примесей. Тогда изменение концентрации вводимой примеси за время  $dt$  на глубину  $x'$  от первоначальной поверхности мишени описывается выражением

$$dN(x') = \frac{j}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x' - vt - R_p}{\Delta R_p}\right)^2\right\} dt \quad (13.1)$$

Здесь в обычное гауссово распределение введена скорость движения распыляемой поверхности

$$v = jS/N \quad (13.2)$$

где  $j$  — плотность потока ионов;  $N$  — количество атомов в  $1 \text{ см}^3$  мишени.

Интегрируя (13.1) с учетом (13.2) и перехода к системе координат, движущейся вместе с распыляемой поверхностью ( $x = x' - vt$ ), получим

$$N(x) = \int_0^t dN(x, t') dt' = \frac{N}{2S} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x + DS/N - R_p}{\sqrt{2\Delta R_p}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - R_p}{\sqrt{2\Delta R_p}} \right) \right] \quad (13.3)$$

В этом случае максимум концентрации примеси

$$N_{\max} = \frac{N}{S} \operatorname{erf} \left( \frac{DS}{2\sqrt{2N\Delta R_p}} \right) \quad (13.4)$$

переместится на глубину  $x_{\max} = R_p - DS/2N$ .

При достаточно высоких дозах облучения  $t \rightarrow \infty$  концентрационный профиль примеси приближается к равновесному, для которого

$$N(x)_p = \frac{N}{2S} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - R_p}{\sqrt{2\Delta R_p}} \right) \quad (13.5)$$

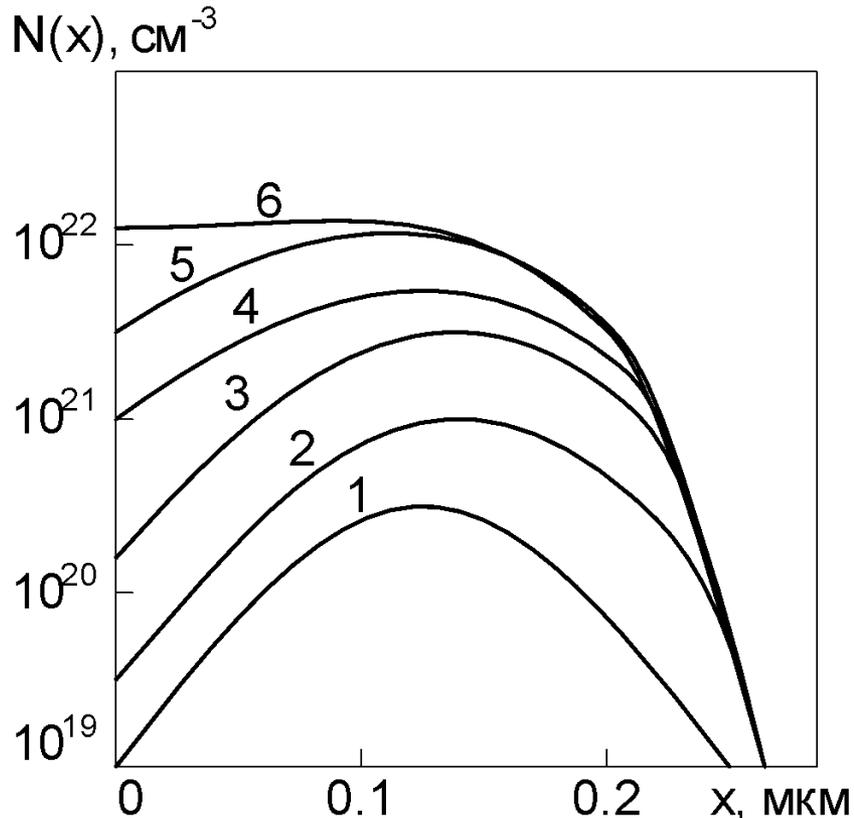
При больших значениях  $S$  максимум в распределении может вообще отсутствовать, а концентрация внедренных атомов будет довольно однородной, начиная от поверхности мишени до достаточно больших глубин.

Значение максимально достижимой поверхностной концентрации атомов

$$N_{\text{пов max}} = \frac{N}{2S} \operatorname{erfc} \left( -\frac{R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right) \approx \frac{N}{S} \quad \text{для } R_p > 3\Delta R_p \quad (13.6)$$

означает, что максимум концентрации лежит на поверхности и для него справедливо выражение (13.6). Эта максимальная концентрация не зависит от дозы имплантации, а определяется, поскольку значение дополнительной функции ошибок в выражении (13.6) заключено между 1 и 2, в основном, отношением атомной плотности материала к коэффициенту распыления.

Как следует из [рис. 13.1](#), при увеличении дозы ионов профиль распределения постепенно трансформируется от гауссовой формы к полкообразной. Увеличение дозы до  $D > 2 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> не приводит к увеличению концентрации внедренных атомов. Предельная концентрация атомов мышьяка соответствует приблизительно  $1,8 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>, что составляет 35 атомных процентов.



*Рис. 13.1.* Распределение имплантированных в кремний ионов мышьяка с  $E = 200$  кэВ и  $S = 3$  атом/ион при различных дозах облучения:

- 1 —  $5 \cdot 10^{15}$ ,
- 2 —  $1 \cdot 10^{16}$ ,
- 3 —  $5 \cdot 10^{16}$ ,
- 4 —  $1 \cdot 10^{17}$ ,
- 5 —  $2 \cdot 10^{17}$ ,
- 6 —  $5 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>.

# Расчет коэффициента распыления

**Распыление** — это процесс, при котором атомы в твердом теле, лежащие близко к поверхности, получают от иона энергию достаточную для выхода в окружающую среду (вакуум). Это явление можно отнести к образованию дефектов в приповерхностном слое во время ионной имплантации.

В зависимости от плотности каскада столкновений можно выделить *три типа процессов распыления*: простое выбивание атомов, режим линейного каскада, режим пика смещений.

В первом случае бомбардирующий ион передаст свою энергию атомам мишени, которые после небольшого числа дальнейших столкновений могут выйти через поверхность. Если при столкновении иона и атома образуется первичный атом отдачи, обладающий достаточной энергией для образования атомов отдачи высоких порядков (вторичных, третичных и т.д.), то число атомов отдачи в каскаде невелико и столкновениями между ними можно пренебречь. Формируется каскад, который называют линейным.

Из каскадной теории столкновений Зигмунда, для плоскостного потенциального барьера поверхности, коэффициент распыления оказывается пропорциональным поверхностной запасенной энергии в упругих столкновениях:

$$S = \frac{\Delta x F_d(x=0, E, \eta)}{\pi^2 U_0} \quad (13.11)$$

где  $\Delta x$  — глубина, на которой переданная от иона энергия на упругие столкновения вносит вклад в  $S$ ;  $F_d(x, E, \eta)$  — функция пространственного распределения энергии, выделенной в упругих столкновениях:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_d(x, E, \eta) dx = v(E) \quad (13.12)$$

где  $\eta = \cos\theta_1$ ;  $\theta_1$  — угол между направлением пучка ионов и нормалью к поверхности,  $U_0$  — энергия связи поверхностных атомов. Координата  $x = 0$  характеризует положение поверхности мишени. Величина  $\Delta x$  соответствует среднему пробегу атомов отдачи  $\Delta x = 3/(4NC_0) \approx 0,5-1,0$  нм,  $C_0$  — константа Зигмунда.

Зигмунд в 1969 г. получил формулу для  $S$  в случае перпендикулярного облучения мишени и в предположении линейного каскада:

$$S = 0,042 \frac{\alpha(M_2/M_1)S_n(E)}{U_0} \quad (13.13)$$

где  $\alpha$  — коэффициент, определяемый только отношением масс падающего иона  $M_1$  и атома мишени  $M_2$  (рис. 13.2),  $S_n(E)$  — сечение упругого торможения,  $U_0 = 7,83$  эВ для кремния и  $7,63$  эВ для германия.

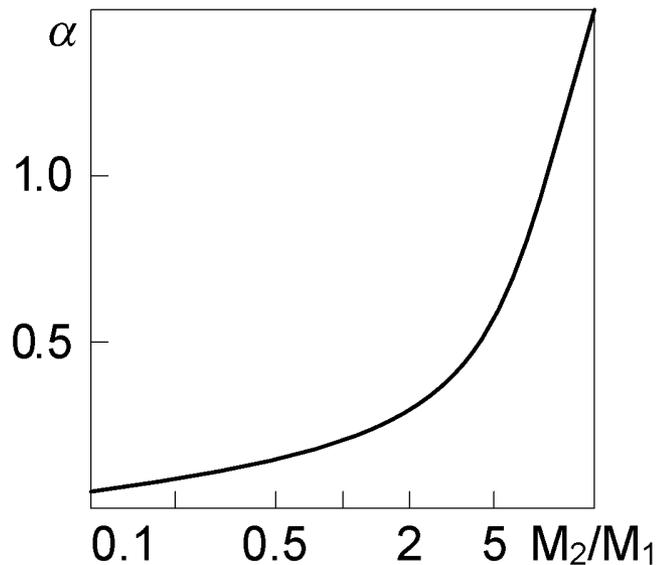


Рис. 13.2. Параметр  $\alpha$  в зависимости от отношения  $M_2/M_1$  для потенциала Фирсова.

Максимум кривой  $S(E)$  для различных тяжелых ионов ( $\text{Ar}^+$ ,  $\text{Kr}^+$ ,  $\text{Xe}^+$ ), бомбардирующих кремний, лежит в пределах 30–300 кэВ (рис. 13.3), а для легких ионов ( $\text{H}^+$ ,  $\text{D}^+$ ,  $\text{He}^+$ ) — 0,2–10 кэВ.

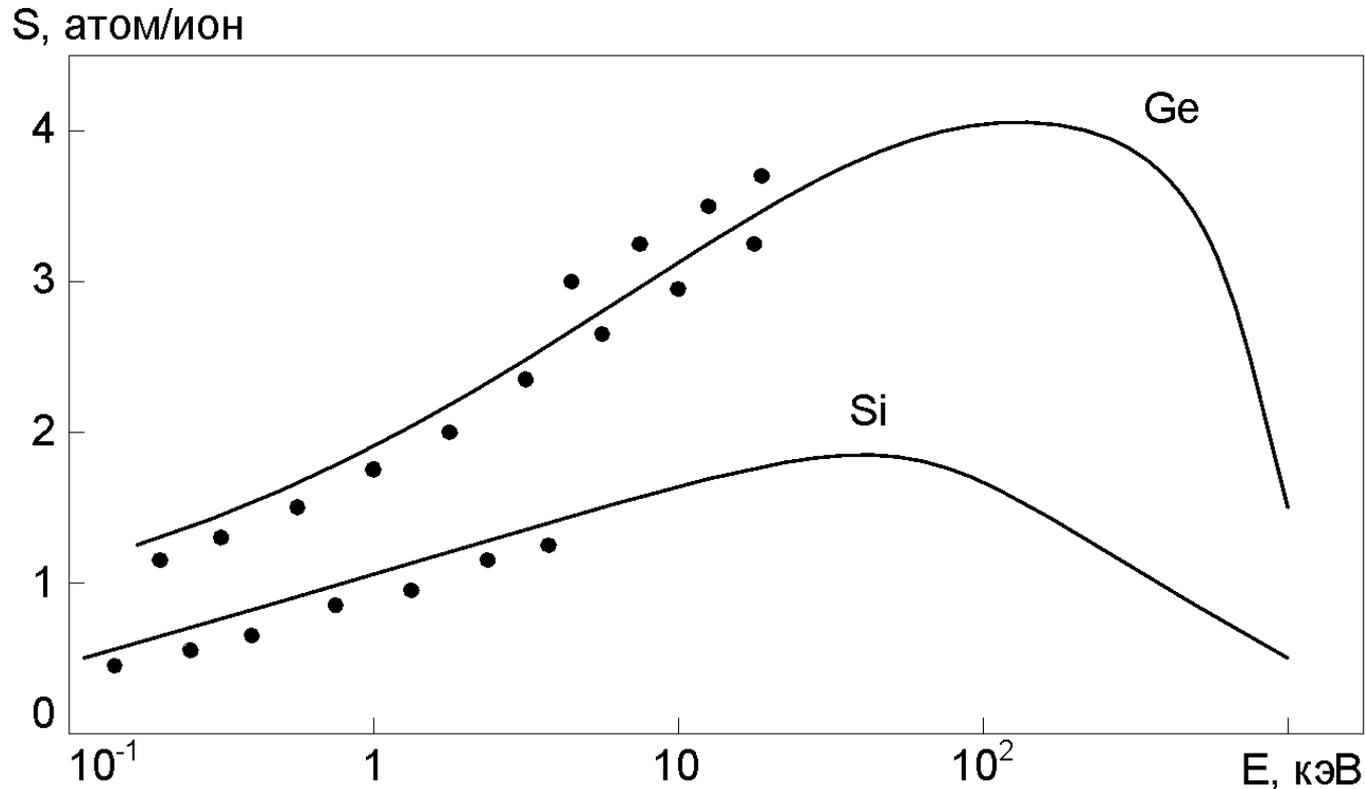


Рис. 13.3. Зависимость коэффициента распыления аморфного кремния и германия ионами аргона от энергии ионов.

# Диффузионное перераспределение примеси

Очень важным эффектом, часто сопутствующим ионной имплантации, наряду с таким чисто имплантационным процессом, как каналирование, является **диффузия**. Необходимо различать несколько видов диффузии. Наиболее известна термическая диффузия, которая может появляться во время проведения необходимого отжига или в процессе имплантации, если полупроводниковый образец сильно нагревается за счет выделяющейся мощности пучка. Под действием ионной бомбардировки образуются многочисленные вакансии, которые уже при относительно низкой температуре могут вызвать диффузию во время имплантации вследствие того, что многие атомы легирующих элементов диффундируют в полупроводниках по вакансиям. Заметную роль может играть также междоузельная диффузия, поскольку часть имплантированных атомов останавливается в решетке в неузловых положениях и до захвата вакансиями может быстро диффундировать по междоузлиям.

При достаточно низких температурах, когда во время облучения нет заметной диффузии, выполняется условие:

$$\left(D^*(T)t_{\text{эксп}}\right)^{1/2} \leq \Delta R_p \quad (13.21)$$

при более высоких температурах:

$$\left(D^*(T)t_{\text{эксп}}\right)^{1/2} > \Delta R_p \quad (13.22)$$

где  $D^*$  — коэффициент термической или радиационно-стимулированной диффузии внедренных атомов,  $T$  — температура облучения,  $t_{\text{эксп}}$  — длительность облучения.

Если предположить, что коэффициент диффузии  $D^*$  постоянен, т.е. не зависит от концентрации дефектов и примеси, времени отжига  $t$ , а исходный профиль имплантированной примеси является гауссовым, тогда решение уравнения Фика (2-й закон Фика)

$$dN/dt = D^* d^2N/dx^2 \quad (13.23)$$

можно представить в виде

$$N(x,t) = \frac{D}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p \sqrt{1 + 2D^*t/\Delta R_p^2}} \exp\left[-\frac{(R_p - x)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}\right] \quad (13.24)$$

При выводе (13.24) в качестве граничного условия предполагается отсутствие обратной диффузии примеси с поверхности кристалла. Значения коэффициентов диффузии атомов основных легирующих примесей в кремнии приведены в табл. 13.1.

Коэффициент диффузии обычно выражается как

$$D^* = D_0^* \exp(-E_a/kT) \quad (13.25)$$

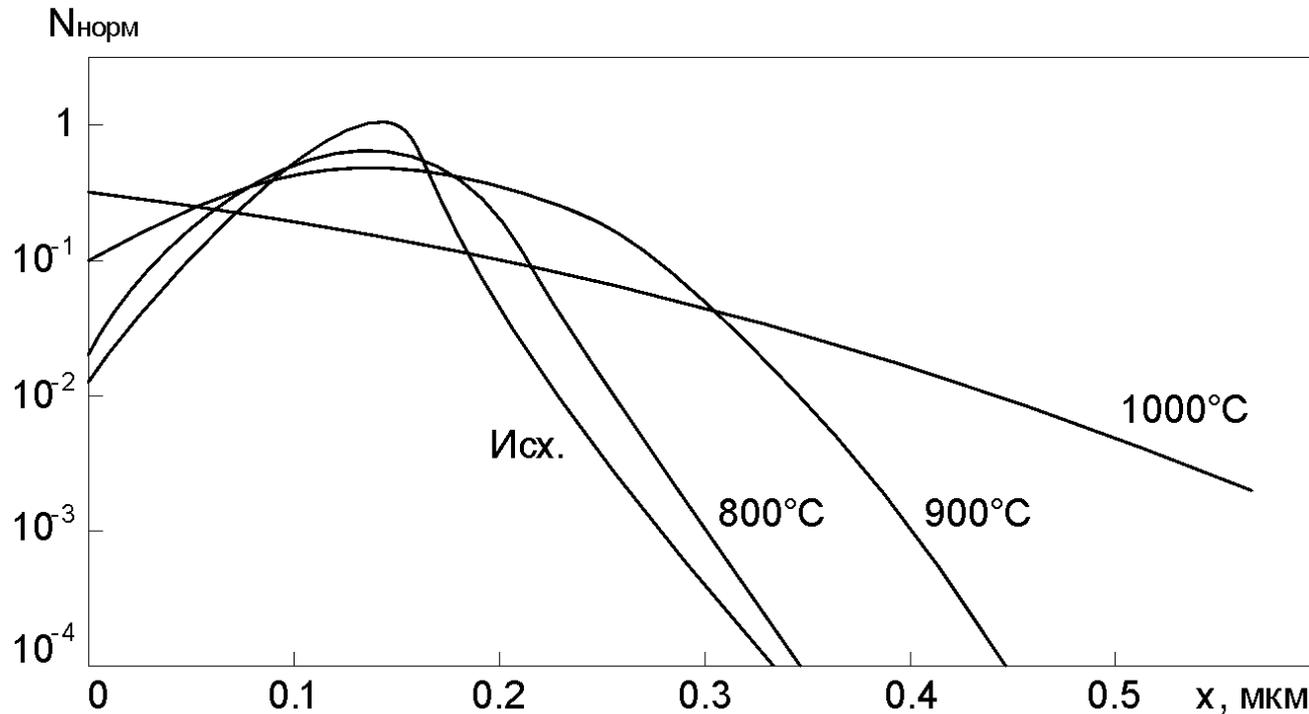
где  $D_0^*$  — предэкспоненциальный множитель,  $E_a$  — энергия активации диффузии,  $k$  — постоянная Больцмана.

*Таблица 13.1*

Коэффициент диффузии некоторых элементов в кремнии

Элемент	$D_0^*$ , $\text{см}^2\text{с}^{-1}$	$E_a$ , эВ	$D(800^\circ\text{C})$ , $10^{-16} \text{см}^2\text{с}^{-1}$	$D(900^\circ\text{C})$ , $10^{-16} \text{см}^2\text{с}^{-1}$	$D(1000^\circ\text{C})$ , $10^{-16} \text{см}^2\text{с}^{-1}$
Al	8	3,47	4,1	100	1500
As	60	4,20	0,012	0,56	14,6
B	0,15	3,19	1,6	30	360
P	10,5	3,69	0,5	15	200
Sb	5,6	3,95	0,016	0,61	13

На [рис. 13.4](#) приведены рассчитанные по уравнению (13.24) диффузионные профили для случая имплантации ионов бора с энергией 40 кэВ в кремний после термообработки при 800, 900 и 1000°C в течение 10 минут. При  $t = 0$  решение переходит в гауссов профиль распределения имплантированных атомов.



*Рис. 13.4.* Изменение профиля имплантированных атомов бора в кремнии за счет термической диффузии (при отсутствии обратной диффузии), нормированное к максимальной концентрации  $N_{\text{max}}$  ( $N_{\text{норм}} = N(x)/N_{\text{max}}$ ). Значения коэффициента диффузии выбраны из табл. 13.1.

# 14. Каскады атомных смещений

$$N_d = v(E)/(2E_d) \quad (14.1)$$

где  $E_d$  — эффективная пороговая энергия смещения атома решетки.  
Для полупроводников значение  $E_d$  заключено между 8 и 30 эВ.

Более строгие расчеты Зигмунда дали подобный результат

$$N_d = 0,84v(E)/(2E_d) \quad (14.2)$$

В **линейных каскадах** коэффициент распыления мишени линейно изменяется с ростом части энергии, выделенной в упругих столкновениях на поверхности  $F_d(x = 0)$ . Среднее расстояние между смещенными из узлов атомами в линейном каскаде оказывается намного больше межатомных расстояний и лишь небольшая их часть в объеме, охваченном каскадом, находится в динамическом движении.

В целом плотность энергии, приобретенная атомами, в этом случае оказывается существенно меньше, чем типичные термодинамические энергии (плавление или сублимации, составляющие порядка 1 эВ) твердых тел. Понятие линейных каскадов адекватно прохождению легких ионов в относительно легких мишенях в широком диапазоне энергий.

Профиль распределения выделенной в упругих соударениях энергии  $F_g(x)$  определяет профиль радиационной поврежденности по глубине кристалла, а концентрация первичных радиационных нарушений в зависимости от глубины рассчитывается по формуле (8.23).

Плотность выделенной на упругие столкновения энергии внутри каждого индивидуального каскада существенно зависит от  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $E$  и плотности атомов мишени  $N$ . Она может колебаться в пределах четырех и более порядков от  $q < 10^{-3}$  эВ/атом до  $q > 10$  эВ/атом. При увеличении массы налетающего иона  $M_1$  и массы атомов мишени  $M_2$  сечение упругого торможения  $S_n$  (а также  $v(E)$ ) увеличивается, что приводит к более высоким плотностям создаваемых атомов отдачи и выделенной энергии. В этом случае наблюдаются отклонения от упоминавшейся линейной зависимости вероятности образования дефектов (пар Френкеля) и коэффициента распыления. Эффективность этих процессов оказывается более высокой.

Проблема временного развития и затухания плотных индивидуальных каскадов атомных столкновений в твердых телах успешно моделируется с помощью методов молекулярной динамики. Моделирование показывает, что начальная кинетическая энергия иона и ПВА распределяется через столкновения с атомами мишени за  $\sim 10^{-13}$  с, создавая каскадную область с высокой плотностью, в большинстве своем, нестабильных дефектов. В течении этой “столкновительной фазы”, средняя кинетическая энергия атомов в каскаде существенно превышает их потенциальную энергию.

В последующем ( $\sim 10^{-12}$  с) часть дефектов ликвидируется путем спонтанной рекомбинации. Эффект спонтанной рекомбинации вакансий и междоузельных атомов сильно выражен в металлах, так как для них характерный объем для спонтанной рекомбинации может превышать 100 атомных объемов. Это означает, что максимальная плотность стабильных дефектов в металлах обычно не превышает 1% от предсказываемого по теории линейных каскадов. В полупроводниках эффекты рекомбинации точечных дефектов на этой стадии слабее выражены. Средняя кинетическая и потенциальная энергии атомов каскада приблизительно равны, хотя они существенно превышают типичные энергии термических процессов.

В заключительной стадии “охлаждения” этой возбужденной области (с продолжительностью  $\sim 10^{-10}$ – $10^{-11}$  с) происходит некоторая рекомбинация мигрирующих дефектов и диссипация избытка энергии в окружающую решетку. Машинное моделирование показывает наличие существенной миграции междоузельных атомов, а также усиленную миграцию вакансий.

В результате атомных столкновений вблизи траектории иона часть атомов мишени выталкивается на периферию и образуется центральное ядро, обогащенное вакансиями, вокруг которого формируется внешняя оболочка из междоузельных атомов. Эти области называют также обедненной и обогащенной зонами соответственно. Обедненные зоны наблюдались непосредственно методами автоэмиссионной и электронной микроскопии.