

*Геннадий Павлович ЛАСКИН —
аспирант кафедры микро- и нанотехнологий
Тюменского государственного университета
Lgp-87@mail.ru*

*Антон Павлович КУЗНЕЦОВ —
аспирант кафедры микро- и нанотехнологий
Тюменского государственного университета
kuznetsov.anton.pavlovich@gmail.com*

УДК 539.23, 51-72

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО ЛЕГИРОВАНИЯ*

SIMULATION OF ION-PLASMA DOPING PROCESS

АННОТАЦИЯ. Создана компьютерная программа для моделирования процесса внедрения ионного пучка в металлы. Представлены результаты моделирования. Сделаны выводы о пригодности использованной модели для описания процессов ионно-плазменного легирования.

SUMMARY. A computer program to simulate the process of introduction of the ion beam in metals is created. The article presents the results of simulation process. The conclusion about the suitability of the model to describe the processes of ion-plasma doping is made.

*КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Ионно-плазменное легирование, поверхность, моделирование.
KEY WORDS. Ion-plasma doping, surface, simulation.*

Технология ионного легирования пучково-плазменными методами основана на обработке пучком ускоренных ионов различных элементов приповерхностного слоя металлов. Данная технология позволяет формировать в приповерхностном слое исходного металла сплавы с заранее заданными свойствами, что позволяет, в частности, значительно повысить износостойкость и коррозионную стойкость изделия. Моделирование ионно-плазменного легирования позволяет увеличить объем знаний о процессах, происходящих при взаимодействии пучка ионов с веществом.

Для описания прохождения заряженных частиц через вещество используется ряд моделей [1]. На рис. 1 представлена зависимость потерь энергии иона от его энергии по различным моделям. Из рисунка видно, что в диапазоне энергий, используемом при ионном легировании (до 100 кэВ) хорошие результаты дает модель Линдхарда, подробное описание которой можно найти в [2].

Согласно модели Линдхарда, движущиеся в подложке ионы теряют энергию в основном за счет двух механизмов: упругих столкновений с атомами мишени (ядерное торможение) и взаимодействия с их электронными оболочками (электронное торможение). В первом приближении считается, что оба вида потерь не зависят друг от друга.

* Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

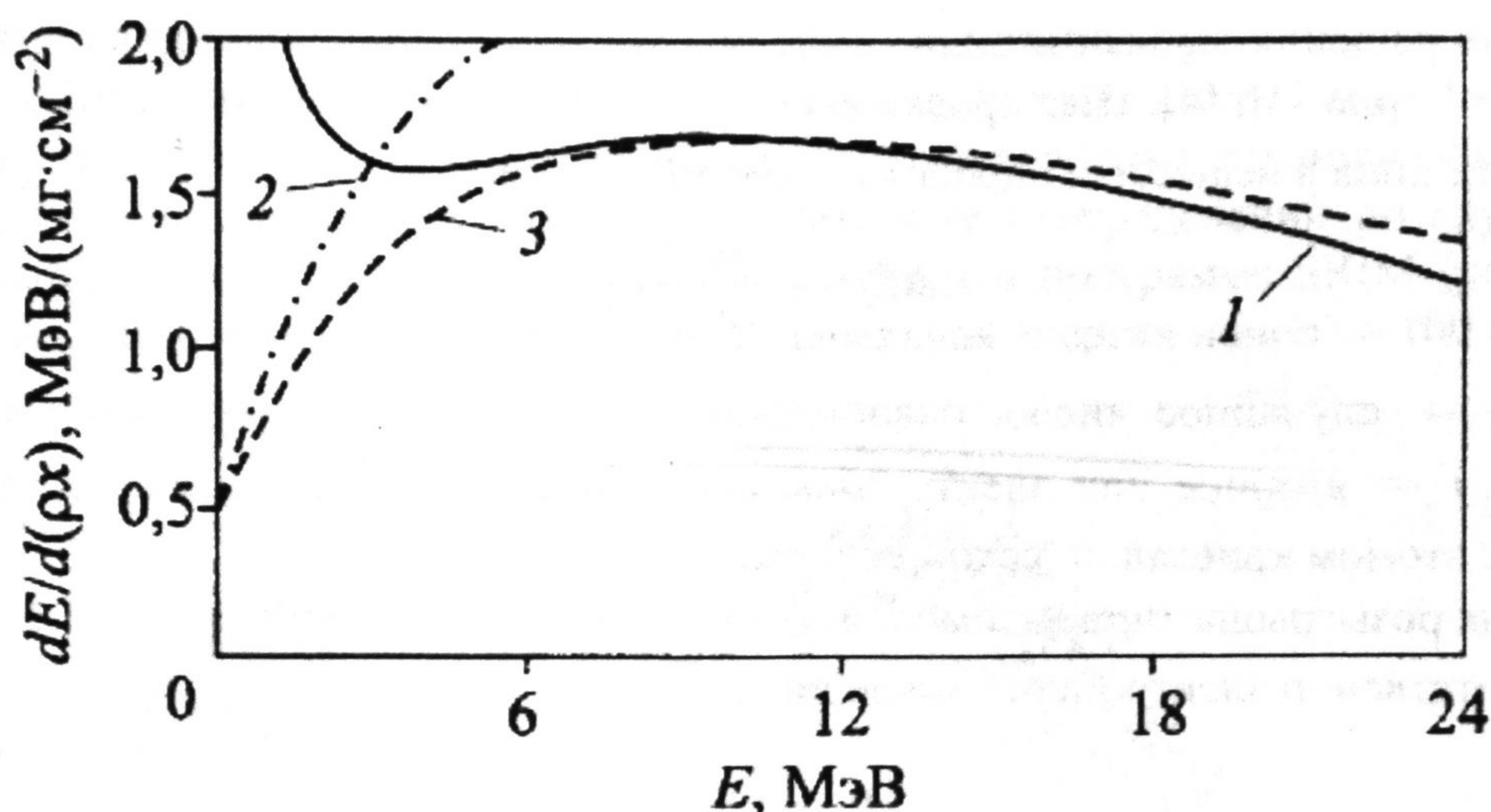


Рис. 1. Удельные потери иона в мишени: 1 — расчет по модели Бете; 2 — расчет по модели Линдхарда; 3 — табличные данные

Потери энергии на ионизацию и возбуждение описываются соотношением:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_e = -c_e E^{1/2},$$

где $c_e = k \sqrt{E_L / 1.6 \cdot 10^{-9}} / (R_L \cdot 10^4)$, E_L — энергия в кэВ, R_L — длина пробега в МКМ

$$E_L = (1 + A) Z_1 Z_2 A a,$$

$$a = 0.468 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2},$$

$$R_L = (1 + A)^2 / 4 \pi A N a^2, \quad A = A_2 / A_1,$$

$$K = \frac{0.0793 Z_1^{2/3} Z_2^{2/3} (1 + A)^{2/3}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} A_2^{1/2}}.$$

Здесь N — плотность атомов мишени, z_1, A_1 — атомный номер и массовое число налетающего иона, z_2, A_2 — атомный номер и массовое число атомов или ионов кристаллической решетки.

Вклад упругого рассеяния в данном приближении:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{nucl} = c_n \left(\frac{E}{A_1} \right)^{1/2} \exp \left[-45.2 \left(c'_n \frac{E}{A} \right)^{0.277} \right],$$

где

$$c_n = 4.14 \cdot 10^6 \left(\frac{A_1}{A_1 + A_2} \right)^{3/2} \left(\frac{Z_1 Z_2}{A_2} \right) (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-3/4},$$

$$c'_n = \frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} \frac{1}{Z_1 Z_2} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

Энергия иона измеряется в МэВ, плотность в г/см³, пробег в см.

Для решения вышеописанной системы уравнений был использован метод Монте-Карло [3]; [4]. Шаг траектории ΔS_k , который равен длине свободного пробега иона в веществе, определяется выражением:

$$\Delta S_k = -\frac{\ln(\xi)}{\Sigma(E_{k-1})},$$

где ξ — случайное число, равномерно распределенное в интервале (0,1), $\Sigma(E_{k-1})$ — ядерное или электронное сечение взаимодействия налетающего иона с атомом кристаллической решетки.

Для розыгрыша типа взаимодействия вычисляются вероятности p_e и p_{nucl} соответственно электронного и ядерного взаимодействий:

$$p_e = \frac{\Sigma_e}{\Sigma_{tot}},$$

$$p_{nucl} = \frac{\Sigma_{nucl}}{\Sigma_{tot}},$$

где $\Sigma_{tot} = \Sigma_e + \Sigma_{nucl}$ — суммарное сечение взаимодействия.

Розыгрыш ξ позволяет определить, какой тип соударения испытает движущийся в кристаллической решетке ион на данном шаге взаимодействия. Если $\xi < p_e$, то считается, что происходит электронное взаимодействие. Если же $\xi > p_e$, то считается, что происходит ядерное взаимодействие.

Потери энергии иона на k -ом шаге взаимодействия определяются соотношением:

$$E_k = E_{k-1} - \frac{dE(E_{k-1})}{dx} \Delta S_k.$$

Расчет ведется до тех пор, пока энергия иона превышает тепловую энергию атомов или ионов кристаллической решетки. После этого считается, что ион остановился.

Наряду с потерями энергии необходимо также разыграть угол рассеяния иона при взаимодействии. Для тяжелых ионов считается, что при электронном взаимодействии траектория частицы не меняется. Розыгрыш угла рассеяния проводится в сферической системе координат. Углы подвижной сферической системы координат ω_k и χ_k отсчитываются от текущего направления движения частицы на данном шаге. С помощью розыгрыша ξ определяем:

$$\cos \omega_k = 2\xi - 1$$

$$\chi_k = 2\pi\xi$$

Преобразование к углам ψ и ϕ относительно неподвижной системы координат производится по формулам тригонометрии.

Компьютерная программа. Для реализации вышеизложенного метода была создана компьютерная программа, позволяющая рассчитывать распределение имплантированных ионов различных элементов по глубине для различных материалов подложек. Программа написана на языке Java.

Для оценки достоверности получаемых результатов результаты выполненных программой расчетов сравнивались с данными, полученными в программе SRIM [5], расчеты которой основаны на квантово-механической модели. В качестве примера приведено сравнение распределений по глубине имплантированных в алюминий ионов углерода в программе SRIM (рис. 2) и в созданной нами программе (рис. 3). Начальная энергия ионов — 100 кэВ.

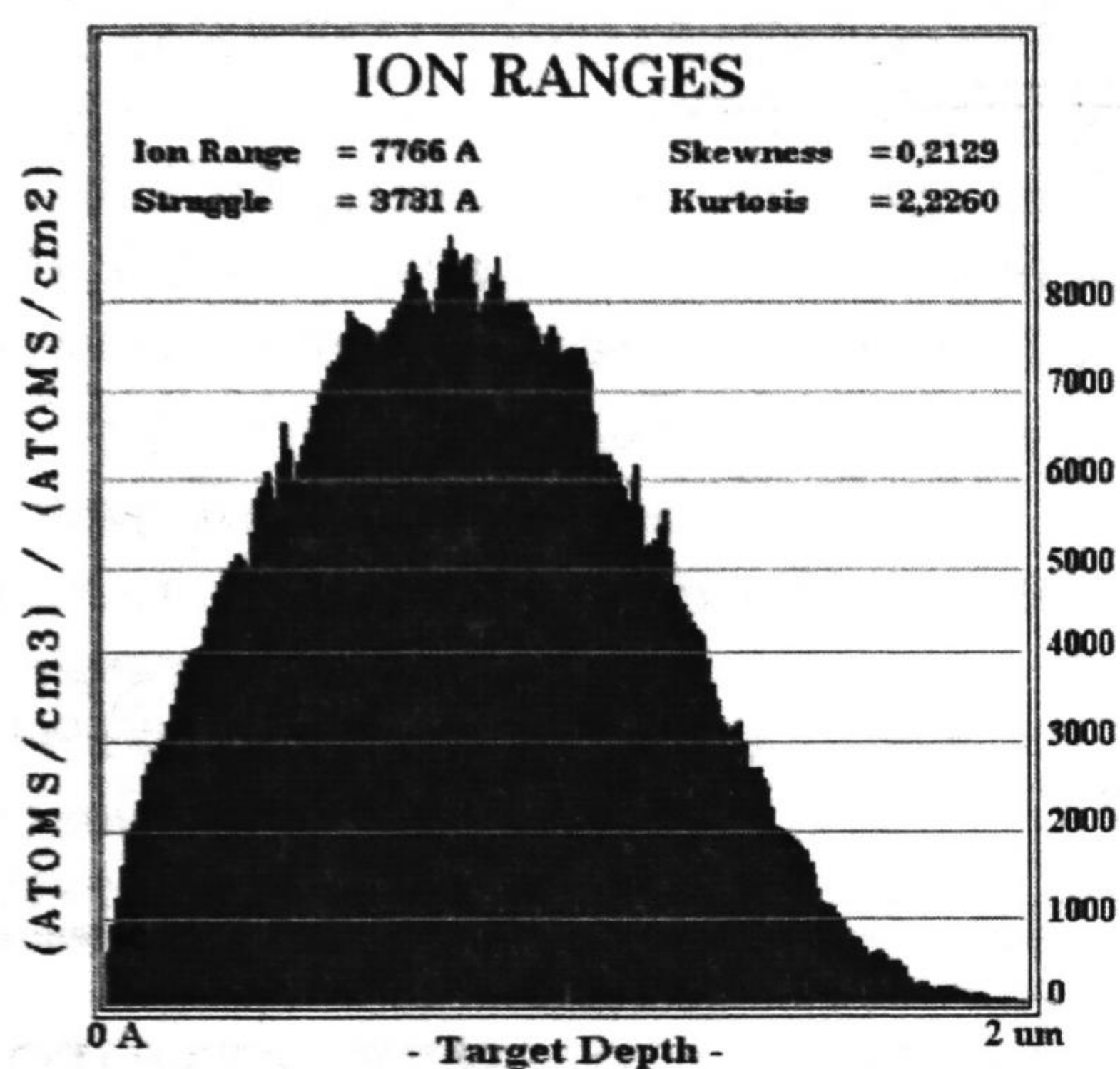


Рис. 2

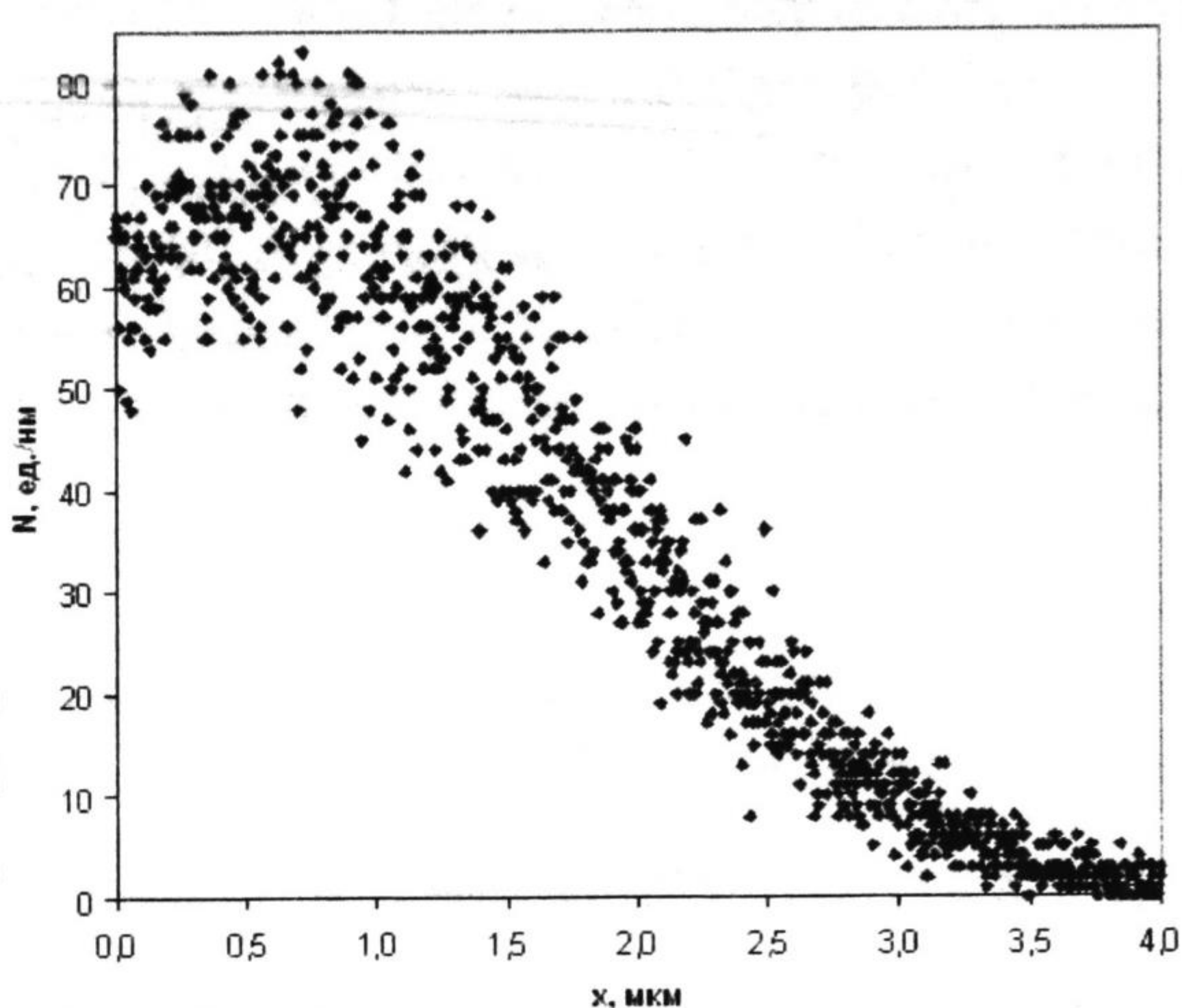


Рис. 3

По результатам сравнения можно сделать следующие выводы. Обе модели дают схожие результаты по глубине максимальной концентрации ионов имплантируемого элемента. Однако наблюдается разница в концентрации имплантированных атомов на поверхности, а также различия в максимальной глубине проникновения имплантированных атомов.

Так как в задачах ионной имплантации осуществляется в основном внедрение тяжелых элементов, можно сделать вывод о пригодности данной модели к описанию проникновения ионов в вещество при ионном легировании.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бойко В.И., Скворцов В.А., Фортов В.Е. и др. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 288 с.
2. Linhard, J., Scharff, M. // Physics Review. 1961. V. 124. № 1. P. 128.
3. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 312 с.
4. Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атом-издат, 1978. 256 с.
5. URL: www.srim.org