

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.8

### РАСЧЕТ ЭВОЛЮЦИИ ВАКАНСИОННЫХ КЛАСТЕРОВ В КРЕМНИИ С УЧЕТОМ ДИФфуЗИИ И ВТОРИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ

© 2008 г.

*Е.Л. Панкратов<sup>1</sup>, Д.И. Тетельбаум<sup>2</sup>*<sup>1</sup> Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород<sup>2</sup> Нижегородский исследовательский физико-технический институт  
Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского

elp2004@mail.ru, tetelbaum@phys.unn.ru

*Поступила в редакцию 16.05.2008*

Теоретически рассмотрена эволюция точечных дефектов при ионном облучении твердых тел. Предложена приближенная аналитическая методика для ее описания с учетом диффузии и наиболее важных вторичных процессов (образование дивакансий и захват вакансий ненасыщающимися ловушками). Расчеты произведены с учетом дискретного во времени и пространстве попадания ионов на поверхность образца. На примере облучения кремния ионами неона рассчитаны зависимости концентрации дефектов от глубины при различных дозах (временах облучения) и зависимость дозы аморфизации от плотности ионного тока.

*Ключевые слова:* радиационные дефекты, эволюция вакансионных кластеров, вторичные процессы, расчет с применением метода осреднения функциональных поправок.

#### Введение

Вопрос об образовании и эволюции точечных дефектов при ионном облучении является одним из ключевых в физике ионной имплантации и радиационной физике. Несмотря на то, что этому вопросу уделялось много внимания, в том числе в теоретических работах, существующие аналитические подходы в основном ограничиваются либо слишком грубыми, либо асимптотическими приближениями [1–4]. При этом часто не учитываются реальные факторы, такие как плотность потока частиц (плотности тока в случае ионного облучения), а также дискретность образования дефектов. Учет этих факторов приводит к математическим трудностям при получении аналитических решений, численные же методы обладают известными недостатками.

В настоящей работе сделана попытка развития приближенного аналитического подхода к этой проблеме с учетом представляющихся наиболее важными вторичных процессов [3, 4].

Решается следующая задача. Рассмотрим среду, в которой при попадании в нее быстрой частицы (например, иона) образовался кластер вакансий с эллипсоидальной симметрией и гауссовым распределением концентрации. Вакансии диффундируют с постоянным коэффициентом

диффузии и участвуют в образовании дивакансий (по бимолекулярному механизму). Одновременно происходит захват вакансий ненасыщающимися ловушками (что математически эквивалентно непрямой рекомбинации с собственными междоузельными атомами). В работе определялись концентрации вакансий и дивакансий, как функции координат и времени, при наложении (в пространстве и времени) на вакансионный кластер, сформированный одной радиационной частицей (ионом), кластеров, созданных другими ионами, в зависимости от дозы и плотности ионного тока. Такая модель позволяет моделировать процесс дефектообразования при различных скоростях набора дозы, в частности, прогнозировать дозу аморфизации. Этот анализ полезен при формировании наноструктур методом ионного облучения кремния в зависимости от сорта ионов и плотности ионного тока. Данная задача решена приближенным методом осреднения функциональных поправок с улучшенной сходимостью. Проанализирован вопрос о пределах применимости этого приближения. Особенностью данного подхода по сравнению с более распространенным, когда концентрация дефектов считается непрерывной и однородной по поверхности образца, является учет пространственно-временной дискретности падения ионов на образец.

### Методика расчета

Рассмотрим эволюцию концентрации радиационных дефектов, образовавшихся в результате попадания в образец твердого тела частиц (ионов), на основе модели [3, 4]. В результате попадания одной частицы образуется кластер вакансий. Предполагается, что междоузельные атомы имеют существенно больший коэффициент диффузии и быстро покидают поврежденную область образца (здесь они будут неявно учитываться только как партнеры по непрямой рекомбинации). Выберем начало координат в центре каскада смещений. Распределение концентрации вакансий  $n_V(l, \varphi, z, t)$  по радиальной ( $l$ ), угловой ( $\varphi$ ) и осевой ( $z$ ) координатам в момент окончания динамической стадии эволюции каскада, принятый за начало отсчета по времени  $t = 0$ , имеет вид:

$$\begin{aligned} n_{V0}(l, \varphi, z, 0) &= f_0(l, \varphi, z) = \\ &= \frac{\pi \Delta l \Delta z N_{V0}}{4\Phi(L/\sqrt{2\Delta l})\Phi(h/\sqrt{2\Delta z})} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{l^2}{2\Delta l^2} - \frac{z^2}{2\Delta z^2}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\Phi(x) = \int_0^x \exp(-y^2) dy$  – функция ошибок

[5];  $N_{V0}$  – полное количество вакансий в начальный момент времени;  $l \in [0, L]$  и  $z \in [-z_0, h - z_0]$  – область распространения вакансий;  $z = -z_0$  – координата облучаемой поверхности образца. Здесь  $h$  – толщина образца, которая считается большой по сравнению с пробегом ионов, а  $L$  вводится таким образом, чтобы эта величина была большой по сравнению с поперечным радиусом кластера, и поэтому выбор  $L$  слабо влияет на результат. Плоскость  $z = 0$  совпадает с плоскостью, на которой расположен максимум начального распределения вакансий по оси  $z$ ; угловая координата изменяется в интервале  $\varphi \in [0, 2\pi]$ . Каскад предполагается цилиндрически симметричным.

Согласно модели [3, 4], с течением времени часть вакансий продиффундирует за пределы исходного кластера, другая часть образует дивакансии, часть аннигилирует при взаимодействии с ловушками, которые будем считать ненасыщающимися и равномерно распределенными с концентрацией  $n_l$ . Во время эволюции данного кластера в образец в случайные моменты времени  $t_k$  и в случайным образом распределенные точки с координатами  $z_k, l_k$  и  $\varphi_k$ , определяемые методом Монте-Карло, попадают другие частицы. Пусть всего попало  $N$  частиц. Каждая час-

тица образует новые кластеры с количеством вакансий в каждом  $N_{Vk}$  и координатами максимума  $z_k, l_k$  и  $\varphi_k$ . Их начальное распределение:

$$\begin{aligned} n_{Vk}(l, \varphi, z, t_k) &= f_k(l, \varphi, z) = \\ &= \frac{\pi \Delta l \Delta z N_{Vk}}{4\Phi(L/\sqrt{2\Delta l})\Phi(h/\sqrt{2\Delta z})} \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{[l - l_k \cos(\varphi_k)]^2}{2\Delta l^2} - \frac{(z - z_k)^2}{\Delta z^2}\right\}, \end{aligned} \quad (1a)$$

где  $k = 1, 2, \dots, N$ .

Динамика вакансий на этапе стабилизации кластеров может быть описана с учетом диффузии вакансий, а также их взаимодействия друг с другом и ловушками. В цилиндрической системе координат  $(l, \varphi, z)$  можно записать:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_V}{\partial t} &= \frac{D_V}{l} \frac{\partial}{\partial l} \left( l \frac{\partial n_V}{\partial l} \right) + \frac{D_V}{l^2} \frac{\partial^2 n_V}{\partial \varphi^2} + \\ &+ D_V \frac{\partial^2 n_V}{\partial z^2} + f_0(l, \varphi, z) \delta(t) + \\ &+ \sum_{k=1}^N f_k(l, \varphi, z) \delta(t - t_k) - K_{VV} n_V^2 - K_l n_l n_V, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $n_V(l, \varphi, z, t)$  – концентрация вакансий, образованных всеми каскадами;  $n_l$  – концентрация ловушек,  $D_V, K_{VV}$  и  $K_l$  – соответственно коэффициент диффузии вакансий, кинетические коэффициенты захвата вакансии вакансией (при образовании дивакансий) и ловушек вакансией,  $\delta(t)$  – односторонняя дельта-функция Дирака [5]. Содержащие дельта-функцию слагаемые уравнения (2) соответствуют генерации новых кластеров дефектов при попадании в образец новых ионов. Далее для простоты будем считать, что пробеги ионов одинаковы и равны  $z_0$ .

Уравнение (2) необходимо дополнить граничными условиями. Формально радиальная составляющая его общего решения является суперпозицией функций Бесселя первого порядка первого и второго рода соответственно. Однако функции Бесселя второго рода являются физически нереализуемыми, что приводит к необходимости приравнивания нулю соответствующей постоянной интегрирования. Ввиду того, что вакансии фактически не достигают границ  $l = L$  и  $z = h - z_0$  (значение  $L$  выбиралось так, чтобы процессы, происходящие при  $l > L$ , не оказывали заметного влияния), концентрация вакансий – непрерывная функция, отсутствуют отрицательные значения угловых координат и считается равным нулю поток вакансий в область значений координаты  $z < -z_0$  (отражающая поверхность), можно принять следующие граничные условия:

$$\begin{aligned} n_V(L, \varphi, z, t) &= 0, \\ n_V(L, \varphi, z = h - z_0, t) &= 0, \\ n_V(l, \varphi, z, t) &= n_V(l, \varphi + 2\pi, z, t), \\ \frac{\partial n_V(l, \varphi = 0, z, t)}{\partial \varphi} &= 0. \end{aligned} \tag{2a}$$

Преобразуем уравнение (2) к следующему интегродифференциальному уравнению:

$$\begin{aligned} n_V(l, \varphi, z, t) &= \frac{D_V}{l} \frac{\partial}{\partial l} \left[ l \frac{\partial}{\partial l} \int_0^t n_V(l, \varphi, z, u) du \right] + \\ &+ \frac{D_V}{l^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \int_0^t n_V(l, \varphi, z, u) du + \\ &+ D_V \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_0^t n_V(l, \varphi, z, u) du + \\ &+ \sum_{k=1}^N f_k(l, \varphi, z) \theta(t - t_{0k}) - K_{VV} \int_0^t n_V^2(l, \varphi, z, u) du + \\ &+ f_0(l, \varphi, z) - K_t n_t \int_0^t n_V(l, \varphi, z, u) du, \end{aligned} \tag{3}$$

где  $u$  – переменная интегрирования по времени, временная единичная функция определяется следующим соотношением [5]:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ 1, & t \geq 0. \end{cases}$$

Уравнение (3) решаем приближенно с помощью метода осреднения функциональных поправок (см., например, [6, 7]). В рамках данного метода функция  $n_V(l, \varphi, z, t)$  и ее производные в правой части уравнения (3) в первом приближении заменяются на пока неизвестные постоянные:  $n_V(l, \varphi, z, t) \rightarrow \alpha_1$  и т.д. Полученное далее решение уточняется следующим образом. Концентрация вакансий в  $m$ -м приближении определяется из уравнения (3) через концентрацию в  $(m - 1)$ -м приближении путем замены в правой части уравнения:  $n_V(r, \varphi, z, t) \rightarrow \alpha_m + n_{V_{m-1}}(r, \varphi, z, t)$ :

$$\begin{aligned} n_{V_m} &= D_V \left\{ \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial l} \left[ l \frac{\partial}{\partial l} \int_0^t n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, u) du \right] + \right. \\ &+ \frac{1}{l^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \int_0^t n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, u) du + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \times \\ &\times \left. \int_0^t n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, u) du \right\} + f_0(l, \varphi, z) + \sum_{k=1}^N f_k(l, \varphi, z) \times \\ &\times \theta \left( \frac{t}{t_{0k}} - 1 \right) - K_{VV} \int_0^t [\alpha_m + n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, u)]^2 du - \\ &- K_t N_t \int_0^t [\alpha_m + n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, \tau)] d\tau, \end{aligned} \tag{4}$$

где

$$\alpha_m = \frac{1}{2\pi h L^2 T} \int_0^T \int_0^{2\pi} \int_{-z_0}^{h-z_0} \int_0^L [n_{V_m}(l, \varphi, z, t) - n_{V_{m-1}}(l, \varphi, z, t)] dl dz d\varphi dt, \tag{5}$$

$t = T$  – момент окончания наблюдения за эволюцией концентрации вакансий (после попадания  $N$  ионов). Подстановка (4) в (5) позволяет получить в окончательном виде соотношения для функции  $n_{V_m}(l, \varphi, z, t)$  и параметра  $\alpha_m$ . Они не приводятся из-за громоздкости.

Практическое применение данного метода затруднено медленной сходимостью. Для уменьшения количества шагов итерационной процедуры функцию  $n_V(l, \varphi, z, t)$  в правой части (3) в первом приближении заменим не на постоянную величину, как в [6], а на более точную аппроксимацию, например на решение уравнения (2) в чисто диффузионном приближении, в котором отброшены два последних члена. В результате такой замены из (3) получаем первое приближение для концентрации вакансий в модифицированном методе осреднения:

$$\begin{aligned} n_{V_1}(l, \varphi, z, t) &= \frac{4h}{\pi L^2} \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\chi, \varphi, \lambda, t) \left( \frac{1}{\lambda^2} - \mu_n^2 \right) - \\ &- \frac{4h}{\pi l^2} \sum_{n=0}^{\infty} n^2 G_{nk} b_n(\chi, \varphi, \lambda, t) + \\ &+ f_0(l, \varphi, z) + \sum_{k=1}^N f_k(l, \varphi, z) \theta(t - t_{0k}) - \\ &- \frac{4}{\pi h} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 0.5)^2 b_n(\chi, \varphi, \lambda, t) - \\ &- \frac{16K_{VV}}{\pi^2 L^2 D_V} \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\chi, \varphi, \lambda) \frac{G_{nk}}{\Omega_{nk}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{G_{ml} b_m(\chi, \varphi, \lambda)}{y_n + y_m} - \\ &- \frac{4K_t h n_t}{\pi D_V} \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\chi, \varphi, \lambda, t), \end{aligned} \tag{6}$$

где

$$\chi = z/h, \chi_0 = z_0/h, \lambda = l/L,$$

$$F_n = \int_0^{2\pi} \int_{-\chi_0}^{1-\chi_0} \lambda f_0(\lambda) g_n(\lambda, \varphi, \chi) d\lambda d\varphi d\chi,$$

$$F_{nk} = \int_0^{2\pi} \int_{-\chi_0}^{1-\chi_0} g_n(\lambda, \varphi, \chi) f_k(\lambda) d\lambda d\varphi d\chi,$$

$e_n(t) = \exp \left\{ - \left[ \mu_n^2 L^2 + \pi^2 (n + 0.5)^2 h^{-2} D_V t \right] \right\}$ ,  $c_n(\chi) = \cos[\pi(n + 0.5)(\chi + \chi_0)]$ ,  $q_n(t) = 1 - e_n(t)$ ,  $C_n(\varphi) = \cos(n\varphi)$ . Здесь  $J_1(\mu_n \lambda)$  – функция Бесселя первого рода первого порядка,  $\mu_n$  – корень уравнения  $J_1(\mu_n \lambda) = 0$ ,  $G_{nk} = F_n + \sum_{k=1}^N \frac{F_{nk}}{e_{nk}(t_k)}$ ,  $y_n = \mu_n^2 h^2 + \pi^2 L^2 (n + 0.5)^2$ ,  $\Omega_{nk} = G_{nk}/y_n$ ,  $g_n(\chi, \varphi, \lambda) = J_1(\mu_n \lambda) c_n(\chi) C_n(\varphi)$ ,  $b_n(\chi, \varphi, \lambda, t) = g_n(\chi, \varphi, \lambda) \times q_n(t) \Omega_{nk}$ .

Зная пространственно-временное распределение вакансий и используя очевидное соотношение:

$$n_{VV}(l, \varphi, z, t) = K_{VV} \int_0^t n_V^2(l, \varphi, z, u) du, \quad (7)$$

можно найти пространственно-временное распределение концентрации дивакансий [1, 3, 4]. В данной работе получено его первое приближение. Приближения более высоких порядков пространственно-временного распределения концентрации вакансий вычисляются аналогично, с использованием (4), (5), а затем из (7) определяются соответствующие приближения пространственно-временного распределения дивакансий.

### Результаты и их обсуждение

Расчеты проводились для случая облучения кремния ионами  $\text{Ne}^+$  с энергией 100 кэВ при разных плотностях потока  $J$  и дозах. Параметры распределения вакансий в каскаде, согласно [8], следующие:  $z_0 = 140$  нм,  $\Delta z = 72$  нм,  $\Delta l = 66$  нм. Для параметров  $D_V$ ,  $K_{VV}$ ,  $K_t$  и  $N_t$  приняты значения, рассчитанные в соответствии с [3, 4]:  $D_V = 2 \times 10^{-11}$  см<sup>2</sup>/с,  $K_{VV} = 4 \times 10^{-21}$  см<sup>3</sup>с<sup>-1</sup> и  $K_t = 5 \times 10^{-18}$  см<sup>3</sup>с<sup>-1</sup>. В общем случае данный метод требует выбора радиуса  $L$  и числа  $N$  падающих на площадку частиц. Так как число  $N$  при заданном  $L$  однозначно определяется дозой, то фактически для данной дозы выбирается только параметр  $L$ . Очевидно, что чем больше значение  $L$ , тем лучше статистика и точнее будет результат, но более длителен расчет. Для определения минимально приемлемых значений  $L$  были выполнены расчеты  $n_V(l, \varphi, z, t)$  и  $n_{VV}(l, \varphi, z, t)$  при различных значениях  $L$  (в единицах  $\Delta l$ , см. (1)). Результаты расчета приведены на рис. 1 для  $N = 17$  и  $J = 2 \times 10^{13}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>, из которого видно, что  $n_V(l, \varphi, z, t)$  и  $n_{VV}(l, \varphi, z, t)$  при  $L > 4\Delta l$  становятся слабо зависящими от величины  $L$  (напомним, что  $\Delta l$  – эффективная ширина каскада (кластера) в плоскости, параллельной поверхности). При этом имеет место достаточно хорошее сглаживание флуктуаций, связанных со статистическим разбросом распределения дефектов от разных каскадов. Выбор значения  $N = 17$  обусловлен выходом на квазинасыщение концентрации вакансий при больших значениях этого параметра.

На рис. 2 приведены временные зависимости концентрации вакансий в начале координат (при  $L = 4\Delta l$ ) при различных плотностях потока частиц  $J$  (плотность тока варьировалась от  $1.6 \times 10^{-3}$  до  $16$  мкА/см<sup>2</sup>). Видно, что при заданных параметрах концентрация вакансий  $n_V$  вы-

ходит на квазистационарный уровень примерно за  $6 \times 10^{-4}$  с практически независимо от плотности ионного тока. С ростом плотности потока  $J$  этот уровень, естественно, увеличивается. Скачки  $n_V$ , связанные с дискретностью актов падения ионов, в выбранном масштабе не видны. Заметим, что мы прекращаем следить за эволюцией вакансий в момент падения последней частицы, т.е. пренебрегаем эволюцией кластера вакансий после облучения.

На рис. 3 представлена временная зависимость концентрации дивакансий в начале координат при тех же значениях  $J$ , что и на рис. 2. Эволюция концентрации дивакансий прослеживается до момента времени, при котором дальнейшее ее изменение становится незначительным. Видно, что  $n_{VV}$  растет со временем (т.е. с дозой), сначала с возрастающей скоростью (вследствие роста концентрации вакансий, из которых дивакансии образуются по бимолекулярному механизму), а затем – практически линейно (в области времен, при которых  $n_V$  выходит на квазистационарное значение).

На рис. 4 и 5 приведены распределения вакансий и дивакансий к моменту попадания частицы с номером  $k = 17$ , что соответствует дозе  $F \approx 1.2 \times 10^{11}$  см<sup>-2</sup>. Плотность потока взята равной  $J = 2 \times 10^{13}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup> (3 мкА/см<sup>2</sup>). Оказалось, что при дальнейшем увеличении числа ионов форма профиля концентрации дефектов меняется слабо. Как видно из рис. 4, для принятых нами параметров за времена, сравнимые со временем выхода  $n_V$  на уровень насыщения, происходит расплывание кластера вакансий. При этом размер кластера дивакансий (рис. 5) меньше размера кластера вакансий. Последнее связано с бимолекулярным механизмом образования дивакансий. Угловые распределения  $n_V$  и  $n_{VV}$ , как и следовало ожидать, практически однородны вследствие принятой ранее нами радиальной симметрии задачи.

Были рассчитаны дозы аморфизации как функции  $J$ . За дозу аморфизации  $F_{\text{ам}}$  принималась доза, при которой концентрация дивакансий достигала 10% от числа атомов кремния Si в единице объема. Из рис. 6 видно, что при малых  $J$  доза аморфизации  $F_{\text{ам}} \approx \text{const}$ , при больших значениях  $J$  она падает приблизительно по закону  $F_{\text{ам}} \sim 1/J$ , а при еще больших  $J$  снова стремится к постоянному значению. Это можно объяснить следующим образом. При малых значениях  $J$  зависимость  $F_{\text{ам}}$  от плотности тока при постоянной дозе слабая из-за того, что свободные вакансии в кластере от каждой частицы почти успевают исчезнуть к моменту попадания в его область следующих частиц, так что кла-

стеры от отдельных частиц эволюционируют квазинезависимо друг от друга. При очень больших  $J$  практически все вакансии, генерированные каждой падающей частицей, к моменту удара следующей частицы выживают в свободном виде, поэтому концентрация дивакансий определяется только дозой, а зависимость от  $J$  опять должна исчезать. Полученные нами дозы аморфизации при плотности тока  $1 \div 10$  мкА/см<sup>2</sup> по порядку величины согласуются с экспериментальными значениями [9], что свиде-

тельствует об адекватном выборе параметров задачи.

Сравнение полученных аналитических результатов для первого приближения с результатами прямого численного решения уравнения (2) показывает различие в 5÷7%. Это свидетельствует о быстрой сходимости используемого нами метода.

В общем случае на перераспределение вакансий, описываемое уравнениями (2) или (3), оказывают влияние диффузия вакансий,

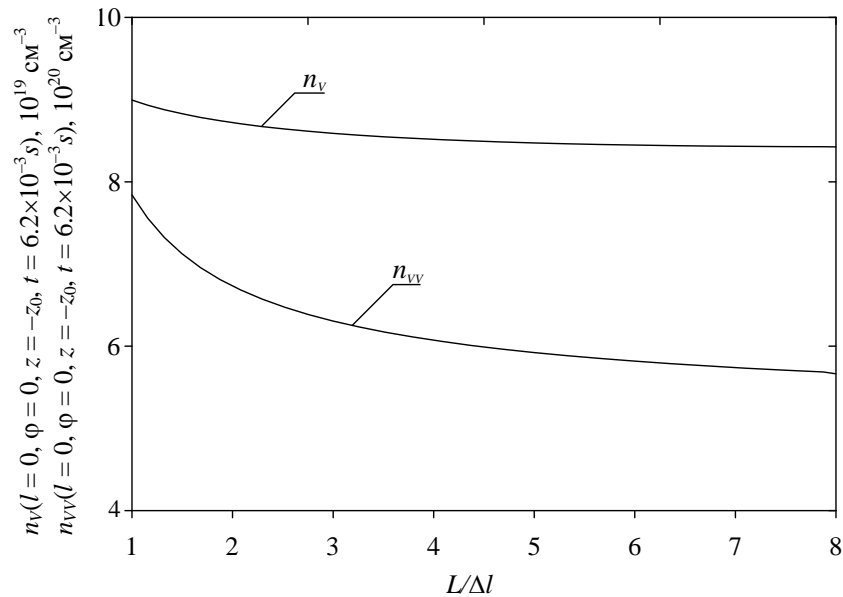


Рис. 1. Зависимость расчетных значений концентрации вакансий (в единицах  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ ) и дивакансий (в единицах  $10^{20} \text{ см}^{-3}$ ) в точке ( $l = 0, \varphi = 0, z = -z_0$ ) при  $t = 6.2 \times 10^{-3} \text{ с}$  от выбора радиуса  $L$  (в единицах  $\Delta l$ ) облучаемой площадки. Выбор  $t = 6.2 \times 10^{-3} \text{ с}$  соответствует времени падения 17-й частицы при  $J = 2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$

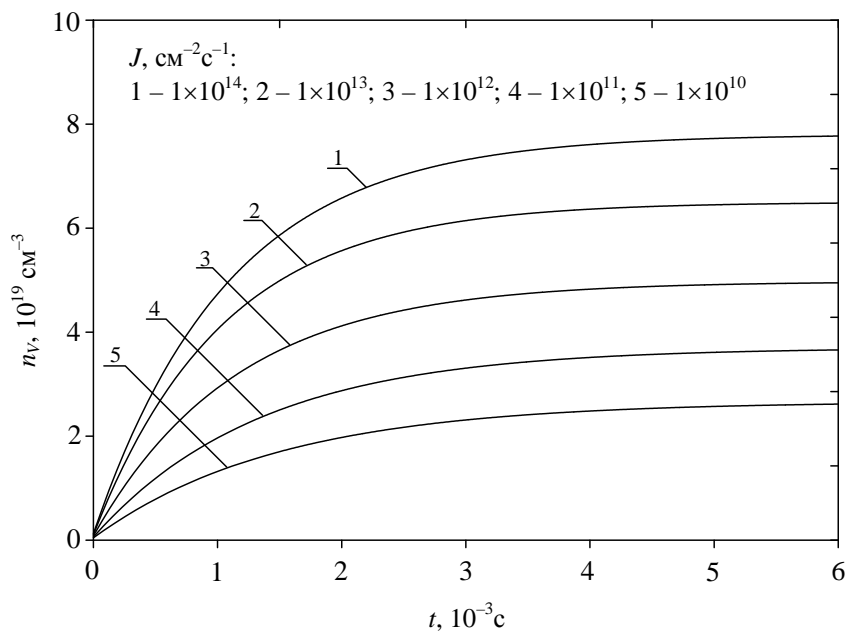


Рис. 2. Зависимость концентрации вакансий  $n_v(l = 0, \varphi = 0, z = 0)$  от времени облучения при  $L = 4\Delta l$  для различных значений  $J$

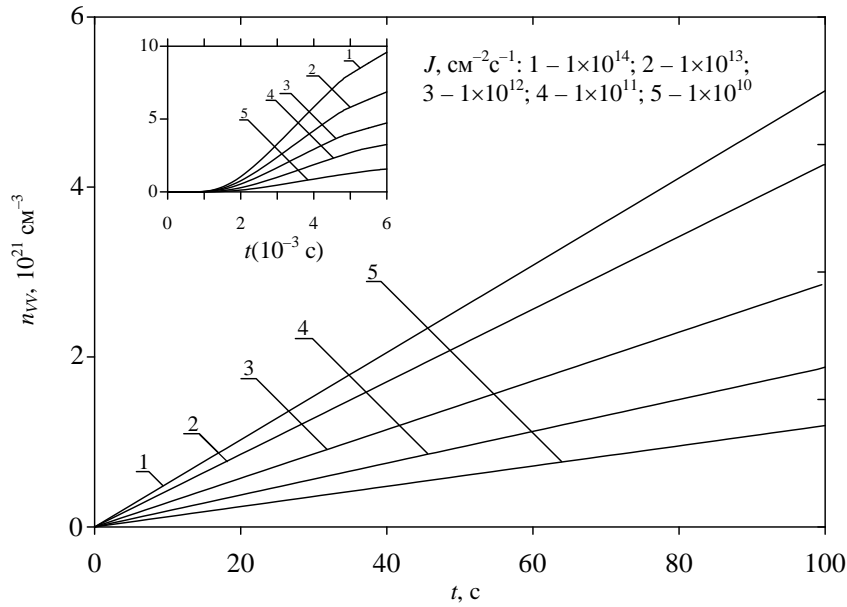


Рис. 3. Зависимость концентрации дивакансий  $n_{VV}(l=0, \varphi=0, z=0)$  от времени при  $L=4\Delta l$  для различных значений  $J$ . На врезке показаны в большем масштабе начальные участки кривых

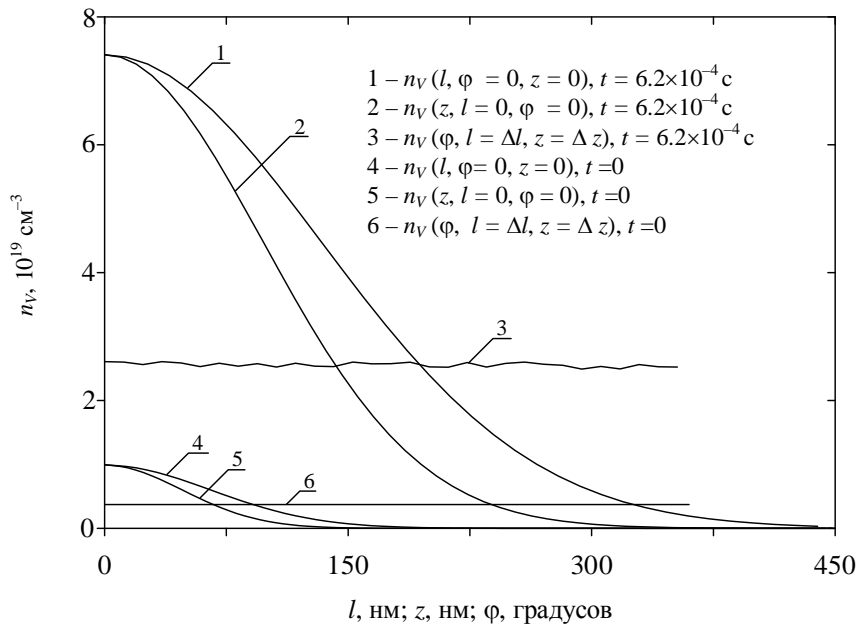


Рис. 4. Зависимость концентрации вакансий от осевой ( $z$ ), радиальной ( $l$ ) и угловой координат ( $\varphi$ ) после попадания 17-й частицы (доза  $F \approx 1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) на площадку с радиусом  $L=4\Delta l$  при  $J=2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$  (кривые 1–3) и распределения вакансий от одной частицы (кривые 4–6). Для кривых 4–6 значения концентрации  $n_V$  увеличены в 10 раз

комплексобразование (образование дивакансий) и взаимодействие вакансий с ловушками. Для оценки относительного влияния тех или иных процессов на кинетику накопления дефектов и дозу аморфизации рассчитаем так называемые функции влияния [10]. Обычно для качественных и некоторых количественных оценок достаточно расчета линейных функций влияния. В нашем случае соответствующие функции имеют вид:

$$\Psi_{1D_V}(l, \varphi, z, t) \Big|_{D_V=0} = \frac{\partial n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial D_V},$$

$$\Psi_{1K_{VV}}(l, \varphi, z, t) \Big|_{K_{VV}=0} = \frac{\partial n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial K_{VV}},$$

$$\Psi_{1K_l}(l, \varphi, z, t) \Big|_{K_l=0} = \frac{\partial n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial K_l}.$$

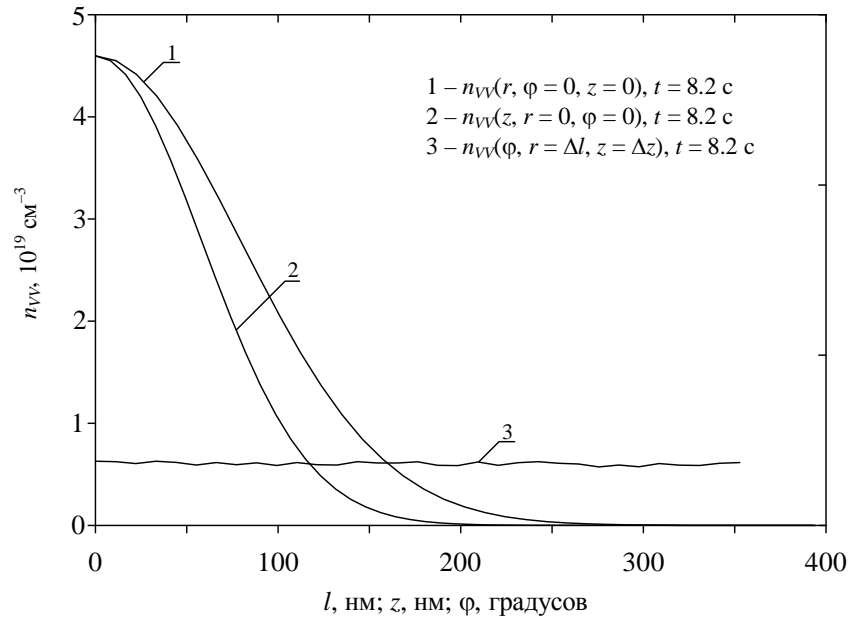


Рис. 5. Зависимость концентрации дивакансий от радиальной, осевой и угловой координат при дозе  $F \approx 1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ,  $J = 2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$  (3 мкА/см<sup>2</sup>)

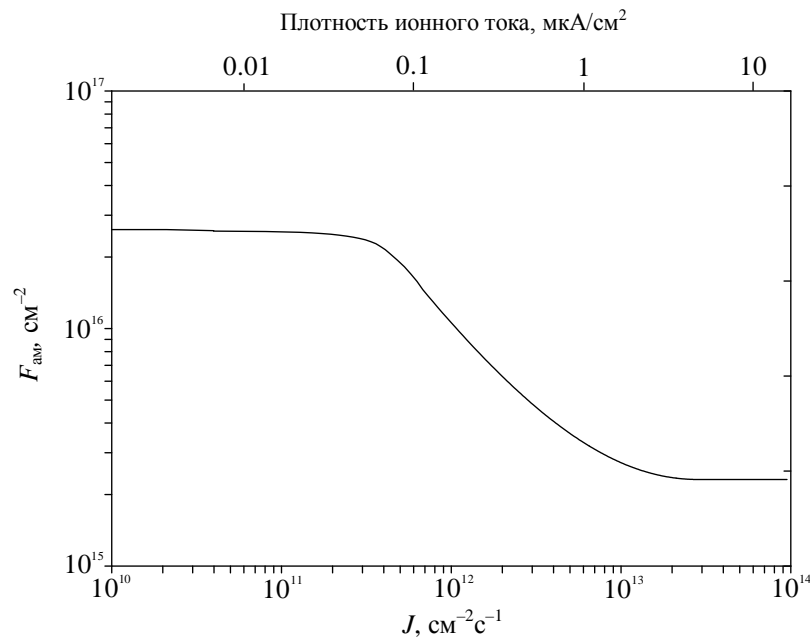


Рис. 6. Зависимость дозы аморфизации  $F_{ам}$  от плотности потока частиц (за  $F_{ам}$  принята доза, при которой  $n_{VV}$  составляет 10% от числа атомов Si в  $1 \text{ см}^{-3}$ )

Иногда требуется учет квадратичных функций влияния, соответственно равных

$$\Psi_{2D_V}(l, \varphi, z, t) \Big|_{D_V=0} = \frac{\partial^2 n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial D_V^2},$$

$$\Psi_{2K_{VV}}(l, \varphi, z, t) \Big|_{K_{VV}=0} = \frac{\partial^2 n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial K_{VV}^2},$$

$$\Psi_{2K_I}(l, \varphi, z, t) \Big|_{K_I=0} = \frac{\partial^2 n_V(l, \varphi, z, t)}{\partial K_I^2}.$$

Функции влияния могут быть вычислены следующим образом. Запишем исходное уравнение (2) в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial l} \left[ l \frac{\partial V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial l} \right] +$$

$$+ \frac{1}{l^2} \frac{\partial^2 V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial z^2} +$$

$$+ f_0(\chi, \varphi, \lambda) \delta(\vartheta) + \sum_{k=1}^N f_k(\chi, \varphi, \lambda) \delta(\vartheta - \vartheta_{0k}) -$$

$$-\varepsilon V^2(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) - \mu V_t V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta), \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \vartheta &= D_V t / L^2, \quad \vartheta_{0k} = D_V t_{0k} / L^2, \quad \varepsilon = 3K_{VV} N_V / 4\pi L D_V, \\ \mu &= 3K_t N_t / 4\pi L D_V, \\ V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) &= 4\pi L^3 n_V(l, \varphi, z, t) / 3N_V, \\ V_t &= 4\pi L^3 n_t / 3N_V. \end{aligned}$$

Для определения функций влияния запишем решение уравнения (8) в виде степенного ряда:

$$V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \sum_{m=0}^{\infty} \mu^m V_{km}(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta).$$

Можно показать (см., например, [11]), что функции  $V_{10}(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  и  $V_{01}(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  совпадают с линейными функциями влияния образования дивакансий и взаимодействия вакансий с ловушками на комплексообразование и распределение вакансий в безразмерных переменных, а функции  $V_{20}(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  и  $V_{02}(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  совпадают с аналогичными квадратичными функциями влияния. Для определения функций влияния диффузионного «расплывания» вакансий целесообразно ввести другие безразмерные величины:  $V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) = 4\pi L^3 n_V(l, \varphi, z, t) / 3N_V$ ,  $\xi = 4\pi D_V L / 3K_{VV} N_V$ ,  $V_t = 4\pi L^3 n_t / 3N_V$ ,  $\vartheta = 3t K_{VV} \times N_V / 4\pi L^3$ ,  $\vartheta_{0i} = 3t_{0i} K_{VV} N_V / 4\pi L^3$ . В этом случае уравнение (2) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \vartheta} &= \xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ \chi \frac{\partial V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \chi} \right] + \\ &+ \frac{\xi}{\chi^2} \frac{\partial^2 V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \varphi^2} + \xi \frac{\partial^2 V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)}{\partial \lambda^2} + \\ &+ \frac{\xi L^2}{D_V} \sum_{k=1}^N \tilde{f}_k(\chi, \varphi, \lambda) \delta \left[ \frac{3K_{VV} N_V}{4\pi L^3} (\vartheta - \vartheta_{0k}) \right] + \\ &+ \frac{\xi L^2}{D_V} \tilde{f}_0(\chi, \varphi, \lambda) \delta \left( \frac{3K_{VV} N_V \vartheta}{4\pi L^3} \right) - \\ &- \frac{N_t K_t}{N_V K_{VV}} V_t V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) - V^2(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta). \end{aligned} \quad (9)$$

Решение данного уравнения может быть получено по аналогии с решением уравнения (8),

т.е. в виде ряда:  $V(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \xi^l V_l(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$ .

Функции  $V_1(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  и  $V_2(\chi, \varphi, \lambda, \vartheta)$  совпадают, соответственно, с линейной и квадратичной функциями влияния диффузии вакансий на эволюцию их распределения (см., например, [11]). Анализ функций влияния показал, что для параметров, принятых в наших расчетах, при выбранных плотностях потока, преобладающий вклад в эволюцию распределения вакансий дает их диффузионное «расплывание». Взаимодействие вакансий с ловушками является следующим по значимости процессом. Процесс обра-

зования дивакансий оказывает минимальное влияние на распределение вакансий. Это означает, что в дивакансии при комнатной температуре связывается лишь малая доля генерируемых вакансий.

## Заключение

В настоящей работе проведен анализ эволюции кластеров вакансий при ионном облучении с учетом диффузии и наиболее важных вторичных эффектов (образование дивакансий и взаимодействия вакансий с ненасыщающимися ловушками). Получена зависимость дозы аморфизации (на примере  $\text{Ne}^+$  с энергией 100 кэВ) от плотности ионного потока при комнатной температуре. Проведен анализ относительного влияния изменений параметров эволюции вакансий на их концентрацию. Данный метод расчета применим не только к ионному, но и к другим видам дефектообразования под действием «надпороговой» радиации, например к случаю облучения быстрыми нейтронами. Анализ легко может быть обобщен на случай образования более сложных, чем дивакансии, комплексов, а также на случай эволюции кластеров из междоузельных атомов и кластеров, включающих оба вида компонентов пар Френкеля, в том числе при различных температурах.

Данная работа поддержана Госконтрактом (№ 02.442.11.7342) и Программой Рособразования (РНП.2.1.1.4022).

## Список литературы

1. Винецкий В.Л., Холодарь Г.А. Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979. 332 с.
2. Pelaz L., Marques L. and Barbolla J. // J. Appl. Phys. 2004. V. 96, № 11. P. 5947–5976.
3. Morozov N.P., Tetelbaum D.I. et al. // Phys. Stat. Sol. 1976. V. 37, № 1. P. 57.
4. Морозов Н.П., Тетельбаум Д.И. // ФТП. 1980. Т. 14. № 5. С. 934.
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1974. 831 с.
6. Соколов Ю.Д. // Прикладная механика. 1955. Т. 1. С. 23–35.
7. Лучка А.Ю. Теория и применение метода осреднения функциональных поправок. Киев: Издательство АН УССР, 1963. 128 с.
8. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Темкин М.М. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскадах атомных столкновений в твердых телах. М.: Энергоатомиздат, 1985. 248 с.



9. Зорин Е.И., Павлов П.В., Тетельбаум Д.И.  
Ионное легирование полупроводников. М.: Энергия,  
1975. 130 с.

10. ГОСТ 8.009-84.  
11. Pankratov E.L. // Phys. Rev. B. 2005. V. 72, № 7.  
P. 075201–075208.

**CALCULATION OF EVOLUTION OF VACANCY CLUSTERS  
IN SILICON TAKING INTO ACCOUNT DIFFUSION AND SECONDARY PROCESSES**

*E.L. Pankratov, D.I. Tetelbaum*

The evolution of point defects produced by ion irradiation of solids has been considered theoretically using the approximate analytical procedure with an account of diffusion and most important secondary processes (formation of divacancies and absorption of vacancies by unsaturable traps). The calculations have been made with regard to space-time discreteness of ion impingements on the sample surface. In the case of silicon irradiated by neon ions, the depth dependences of defect concentration for various doses (irradiation intervals) and the amorphization dose dependence on the ion flux have been calculated.