

Математическая модель процесса ионной имплантации

Соколов С.В., Щекотова И.В., Доброжан А. А.
Сумский государственный университет, svsv71@mail.ru

Ion implantation technique is widely used for the modification of physical-chemical and mechanical properties of surface layers of metals and construction materials. The main purpose of this work is to obtain a mathematical model of the process of implantation of ions. The model is a generalization and improvement of the previously existing theoretical models (for finding the parameters of R_p max and N_{max}) and for the construction of the concentration profiles on the basis of these parameters are summarized experimentally obtained data.

ВВЕДЕНИЕ

Одним из современных методов поверхностной обработки материалов высокоэнергетическими частицами является ионная имплантация. Этот метод не зависит от пределов химической растворимости и концентрации материала примеси на поверхности кристалла, а также от температуры в процессе имплантации [1].

В основном для изучения процессов, происходящих в материале при ионной имплантации, используются экспериментальные методы. Но их применение достаточно дорогостоящее. Поэтому, целью данной работы является получение математической модели имплантации ионов, в основе которых лежат эмпирически полученные формулы.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ

Одной из важных характеристик, определяющих судьбу ускоренного иона, внедряемого в твёрдое тело, является его пробег, т.е. тот путь, который он проходит до остановки. Траектория каждого иона в твёрдом теле представляет собой сложную кривую. Поэтому при рассмотрении большого количества падающих ионов (событий), чаще говорят о глубине, на которой остановится ион. Эта величина называется проецированным (проективным) пробегом R_p . Вторым важным параметром ионно-имплантированных материалов является максимальная концентрация имплантированных элементов N_{max} . При насыщении материала легирующей примесью до определённого предела, соответствующего формированию стабильной или метастабильной фазы, последующая имплантация ионов не приводит к увеличению концентрации примеси. Современные теоретические подходы [2, 3] хорошо описывают поведение распределений внедрённых атомов в слоистых структурах в широком диапазоне энергий (10 кэВ - 1 МэВ) [3].

МОДЕЛЬ РАСЧЕТА

Одним из факторов, ограничивающих достижение максимальной концентрации, является процесс распыления. Он характеризуется коэффициентом распыления Y . Представленная модель позволяет, определив коэффициент распыления, рассчитать максимальную концентрацию имплантированных ионов. Для определения коэффициента распыления поверхности использовали следующие понятия сечения торможения (или удельные потери энергии на единицу пути), определяемого по формуле:

$$S(E) = \frac{1}{N_x} \left[- \left(\frac{dE}{dx} \right) \right] \quad (1)$$

где S – сечение торможения;

N_x – концентрация атомов в материале.

$$N_x = N_A \rho / M_2 \quad (2)$$

где $N_A=6.0248 \times 10^{23}$ атом/моль - число Авогадро;

ρ - массовая плотность вещества;

M_2 - массовое число для атомов мишени.

В случае ядерных потерь энергии ионов наиболее точным выражением для сечения ядерного торможения $S_n(\epsilon)$ в единицах ϵ является:

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.3833\epsilon)}{\epsilon + 0.013218\epsilon^{0.21226} + 0.19594\epsilon^{0.5}} \quad (3)$$

где ϵ - приведённая энергия.

$$\epsilon = \frac{a E_{\text{отн}}}{Z_1 Z_2 e^2} \quad (4)$$

где a - параметр экранирования Томаса-Ферми;

$E_{\text{отн}}$ - относительная энергия;

Z_1 и Z_2 - заряды иона и атома мишени, соответственно.

Параметр экранирования Томаса - Ферми:

$$a \approx \frac{0.885a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}} \quad (5)$$

где $a_0=5.3 \times 10^{-9}$ см - первый Боровский радиус атома водорода.

В качестве функции распределения ионов по глубине x мишени выбирают распределение Гаусса:

$$N(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left\{-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right\} \quad (6)$$

где D - интегральная доза облучения (флюенс) на единицу площади мишени;

ΔR_p - продольным разбросом пробегов (продольный страгглинг).

Для такой функции распределения значение $x=R_p$ отвечает максимальной концентрации примеси:

$$N_{\text{max}} = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \quad (7)$$

где R_p - средний проективный пробег (глубина, на которой находится максимальная концентрация примеси) [4]. В режиме насыщения максимальная концентрация имплантированной примеси N_{max} равна:

$$N_{\text{max}} = \frac{n_0}{Y} \quad (8)$$

где n_0 - число атомов материала мишени в 1 см^3 ;

Y - коэффициент распыления.

Тогда максимальный проективный пробег будет равен:

$$R_{\text{max}} = \frac{DY}{n_0} \quad (9)$$

где D - интегральная доза облучения (флюенс) на единицу площади мишени.

ВЫВОДЫ

Представленная модель является обобщением и усовершенствованием ранее имеющихся теоретических моделей (для нахождения параметры $R_{p \text{ max}}$ и N_{max}). Получены достаточно

несложные расчёты, которые могут быть реализованы с помощью простых программных средств (к примеру, MathCAD). В качестве примера было произведено сравнение экспериментальных результатов по имплантации ионов железа в соединение Ti-V-Al с результатами, полученными при использовании этой модели [5]. Погрешность модели описания профиля внедрённых атомов составляет до 20%, что позволяет использовать её для оценочных расчётов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твёрдые тела.–Минск: УП "Технопринт".-2001.-392с.
Burenkov A.F., Komarov F.F., Temkin M.M.//Rad. Eff. Lett. 1984. V. 86. № 5 P. 161-168.
Pelikan L., Rybka V., Krejci P., e. a. //Phys. Stat. Sol. (a). 1982 V.72№2.P.369-373.
Комаров Ф.Ф. Ионная имплантация в металлы. М.: Металлургия, 1990.–216с.
Pogrebnyak A.D., Kobzev A.P., Gritsenko B.P., Sokolov S., Bazyl E., Sviridenko N.V., Valyaev A.N., Ivanov Yu.F.
Effect of Fe and Zr ion implantation and high-current electron irradiation treatment on chemical and mechanical properties of Ti-V-Al alloy // J. Appl. Phys.–2000.–Vol.87, № 5.-P.2142-2148.

