

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P14-96-335

А.Ю.Дидык, В.А.Кузьмин

ВЛИЯНИЕ ТРЕКОВЫХ ЭФФЕКТОВ
НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ,
ОБЛУЧЕННОМ ИОНАМИ КРИПТОНА
С ЭНЕРГИЕЙ 210 МэВ

1996

Влияние трековых эффектов на распределение дефектов в кремнии, облученном ионами криптона с энергией 210 МэВ

Наблюдаемая концентрация дефектов в кремнии, облученном ионами криптона с энергией 210 МэВ, обнаруживает в пространственном распределении, наряду с существованием стандартного пика, второй пик, расположенный на большем расстоянии от облучаемой поверхности. Амплитуда второго пика растет быстрее, по сравнению с первым, и при определенном флюенсе превышает амплитуду первого пика. Данный экспериментальный факт объясняется образованием специфической области вдоль пробега иона — латентного трека, в центральной части которого плотность кремния ниже, чем в неповрежденном материале. Развита феноменологическая модель накопления точечных радиационных дефектов, на основе которой получено значение радиуса зоны пониженной плотности, а также параметры диффузии вакансий, которые согласуются с имеющимися оценками. Проведено сравнение экспериментальной зависимости распределения дефектов вдоль проективного пробега с расчетной.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1996

Influence of Track Effects on Defect Distribution in Silicon Irradiated by 210 MeV Krypton Ions

The second peak in the defect distribution, located beyond the standard one, has been observed into silicon samples, irradiated by krypton ions with an energy 210 MeV. The rate of the second peak amplitude increase is higher with respect to the first one. The amplitude of the second peak exceeds the amplitude of the first peak under the certain influence. This experiment has been explained by the latent tracks formation along the projected range. The phenomenological model of the point defect balance has been developed. The value of the lowered density zone radius and the parameters of the point defect diffusion of the model, which is in an agreement with the existing estimations, have been found. The comparison of the experimental and the calculated distributions of the defects has been performed.

The investigation has been performed at the Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

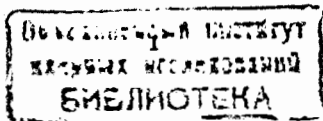
1. ВВЕДЕНИЕ

Явления, происходящие при движении высокоэнергетической заряженной частицы в твердом теле, длительное время привлекают к себе внимание. В начале это направление исследований было стимулировано возможностью регистрации осколков деления ядер и ускоренных ионов твердотельными трековыми детекторами [1, 2]. В дальнейшем работы, связанные с модификацией материалов, в частности, созданием новых пространственных структур в полупроводниковых монокристаллах [7, 8], исследования по влиянию ионизационных потерь энергии на эволюцию дефектной структуры [3, 4], а также эксперименты по радиационной стойкости интегральных микросхем [5, 6], получили значительное развитие в ведущих центрах по физике тяжелых ионов высоких энергий. Данная проблема также представляет большой интерес с точки зрения основ физики твердого тела.

Одним из наиболее важных эффектов, возникающих при движении быстрого иона (с энергией $E > 1$ МэВ/нуклон) в твердом теле, является образование специфической области вдоль пробега иона — трека, микроструктура которого существенно отличается от строения исходного образца. В некоторых диэлектриках треки можно наблюдать непосредственно с помощью электронного микроскопа. Один из наиболее успешных методов визуализации трека заключается в использовании избирательного химического травления. При такой обработке треки проявляют себя увеличенной в сравнении с неповрежденным материалом скоростью химического травления. Возможно обнаружение треков за счет преципитации примеси в поврежденной зоне. В металлических стеклах пластическое течение материала в направлении, перпендикулярном направлению падающего пучка, объясняется образованием латентных треков [9]. Ускоренная диффузия примеси в полупроводниках, облученных ионами высоких энергий [10, 11], вероятно, также обусловлена возникновением треков.

К настоящему времени развиты несколько моделей формирования трека. Известно, что практически вся энергия быстрого иона затрачивается на ионизацию и возбуждение электронов. В соответствии с моделью "теплового клина" [3, 12] электроны за время $\sim 10^{-15}$ с термализуются и затем посредством электрон-фононных и фонон-фононных взаимодействий за время $\sim 10^{-12}$ с передают свою энергию ближайшим атомам. Латентный трек образуется при быстром остывании цилиндрической области расплавленного вещества, образующейся вдоль траектории движения имплантируемого иона. Модель "кулоновского взрыва" [13, 14] объясняет механизм формирования трека кулоновскими силами расталкивания ионов остова, возникающими в результате высокой степени ионизации, создаваемой при торможении падающей частицы. Трек образуется, если (i) силы кулоновского отталкивания достаточны для разрыва решеточных связей, и (ii) подвижность электронов и дырок мала, что обеспечивает возможность значительных перемещений ионов решетки за время релаксации заряда. В работе [4, 15] обсуждается влияние пространственной и временной когерентности возбуждений, приводящей к генерации ударных волн, что может быть причиной образования дефектов.

Различные методы измерения характеристик трека показывают, что в диэлектриках трек представляет собой трубчатую структуру, содержащую аморфное



ядро с радиусом R_{tr} порядка нескольких нанометров, окруженное сильно сжатой оболочкой. Атомная плотность ядра трека ниже плотности матрицы. Существует пороговая энергия пучка, E_t , ниже которой треки не формируются. Радиус трека сильно зависит от электронных потерь энергии, $(dE/dx)_e$, и в случае образования непрерывного цилиндрического трека пропорционален им, $R_{tr} \sim (-dE/dx)_e$.

В последние годы опубликовано много работ [16-24], результаты которых демонстрируют значительное отличие измеряемых профилей дефектов, создаваемых в результате высокоэнергетической ионной имплантации, от профилей, предсказываемых стандартной теорией [26, 27]. Экспериментальные профили существенно шире и имеют характерные "хвосты", залегающие заметно глубже расчетной длины пробега. В работах [18, 22] сделано предположение о том, что результаты экспериментов могут быть объяснены некоторым видом каналирования. В работе [24] предлагается рассматривать в качестве области каналирования треки, созданные ранее прошедшими ионами. По мнению авторов этой работы [24], сильно сжатая внешняя область трека способна удерживать ионы, летящие под небольшими углами к его оси. Испытывая множественные отражения, ион движется в области пониженной плотности, что увеличивает длину пробега.

При исследовании профиля распределения дефектов методом рентгеновской дифракции в кремнии с ориентацией поверхности [111], облученном ионами Kr^{84} с энергией 210 МэВ при флюенсах от 10^{12} ион/см² до 10^{14} ион/см², было обнаружено, что по мере увеличения флюенса происходит образование второго пика повреждений, расположенного глубже первого [25]. Амплитуда второго пика растет с увеличением флюенса быстрее в сравнении с амплитудой первого (стандартного пика) и при определенном флюенсе превышает амплитуду первого пика. Экспериментальные зависимости концентрации дефектов от проективного пробега ионов Kr^{84} в кремнии [111] в зависимости от флюенса [25] представлены на рисунке 1.

Цель настоящей работы заключается в построении феноменологической модели, объясняющей обнаруженный эффект, и экстраполяции экспериментальных кривых расчетными.

2. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Траектория движения быстрого иона в твердом теле представляет собой почти прямую линию, поскольку сечение рассеяния на ионных остовах относительно мало, так что его энергия практически полностью затрачивается на ионизацию и возбуждение электронов. Только при понижении энергии иона (примерно до 200-300 кэВ для тяжелых ионов) важную роль начинают играть упругие взаимодействия, что приводит к отклонению иона на большие углы.

Мы будем полагать, что в результате прохождения иона вокруг его траектории образуется аморфизованная область цилиндрической формы, средняя плотность вещества которой, ρ_{tr} , меньше исходной плотности ρ . Длина и радиус этого цилиндра определяются уровнем электронных потерь энергии, $(dE/dx)_e$.

С ростом флюенса растет и вероятность попадания последующего иона пучка в уже образовавшийся трек. Очевидно, что эта вероятность равна относительной площади, занимаемой треками на поверхности образца. Мы будем считать, что попадание нового иона не приводит к изменению геометрии трека и плотности вещества в нем.

Движение иона внутри области пониженной плотности и будет приводить к возникновению второго пика в распределении дефектов.

Необходимо отметить, что для проверки предположения об источнике возникновения второго пика в распределении дефектов был поставлен специальный эксперимент, который заключался в следующем: как видно из рис. 1 при флюенсах менее 10^{12} ион/см² второй пик не наблюдается, поэтому флюенс $F \approx 5 \times 10^{13}$ ион/см² набирался с шагом 10^{12} ион/см² и последующим поворотом облучаемой поверхности на малые углы по отношению к направлению ионного пучка после набора очередного флюенса. При исследовании этих образцов методом рентгеновской дифракции не было обнаружено образование второго пика в распределении дефектов. Этот результат подтверждает предположение о природе его возникновения.

Чтобы учесть процессы рекристаллизации, происходящие при облучении [28, 29], введем параметр s_l , равный относительной площади поверхности образца, занимаемой кристаллической фазой в пределе $t_{облучения} \rightarrow \infty$. Обозначая площадь, занимаемую треком на облучаемой поверхности образца, через S_{tr} , а количество треков на единице площади этой поверхности через n , имеем:

$$n = \frac{1 - s_l}{S_{tr}} \cdot [1 - \exp(-JS_{tr}t)], \quad (1)$$

где J обозначает плотность потока ионов и t - время.

В рамках развиваемой модели образец представляет собой кристалл, в котором имеются цилиндрические включения аморфизованного вещества. Исходя из соображений простоты, мы будем строить одномерную модель. Пусть ось x направлена внутрь образца, перпендикулярно его поверхности и пучок падает вдоль этой оси. Запишем уравнения баланса точечных дефектов в кристаллической области:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial x^2} + G_\alpha(x, t) - k_{iv} C_i C_v. \quad (2)$$

Индексы i, v обозначают междоузлия и вакансии соответственно, а индекс α принимает значения i или v , C_α - атомные концентрации точечных дефектов, D_α - коэффициенты диффузии. Коэффициент рекомбинации k_{iv} может быть выражен уравнением [30]:

$$k_{iv} = \frac{4\pi a_{iv}}{\Omega} (D_i + D_v) \exp\left[-\frac{\Delta E_{iv}}{kT}\right], \quad (3)$$

где Ω - объем единичной ячейки, равный a^3 (a - постоянная решетки), a_{iv} - радиус зоны рекомбинации, примерно равный удвоенной постоянной решетки $a_{iv} \approx 2a$, ΔE_{iv} - энергетический барьер рекомбинации, k - постоянная Больцмана и T - температура образца.

Коэффициенты диффузии запишем в виде

$$D_\alpha = D_\alpha^0 \exp(-E_\alpha^m/kT), \quad (4)$$

где величина E_{α}^m обозначает энергию активации миграции дефекта.

Скорость генерации точечных дефектов G_{α} можно представить как

$$G_{\alpha}(x, t) = g_{\alpha}(\rho|x) \cdot JS_{tr}n + g_{\alpha}(\rho|x) \cdot \left[\frac{dn}{dt} + Js_l \right]. \quad (5)$$

В этой формуле $g_{\alpha}(\rho|x)$ - сечение образования дефектов типа α на глубине x в веществе плотности ρ . Первое слагаемое в этой сумме соответствует инжекции точечных дефектов из области трека, тогда как остальные члены учитывают дефектообразование при прохождении иона через неповрежденную зону.

Система уравнений (2) решалась численно. Параметры, входящие в феноменологическую модель, выбирались следующими:

Величина	Обозначение	Число	Единицы
Энергия миграции вакансий	E_v^m	0.4	эВ
Энергия миграции междоузлий	E_i^m	0.22	эВ
Предэксп. мн. коэфф. дифф. вак.	D_v^0	0.021	$\text{см}^2\text{с}^{-1}$
Предэксп. мн. коэфф. дифф. межд.	D_i^0	0.006	$\text{см}^2\text{с}^{-1}$
Постоянная решетки	a	$2.35 \cdot 10^{-8}$	см
Плотность вещества матрицы	ρ	2.32	$\text{г} \cdot \text{см}^{-3}$

Граничные и начальные условия имели вид $C_{\alpha}(x, 0) = C_{\alpha}(0, t) = C_{\alpha}(L, t) = 0$. В расчетах толщина облучаемого образца была взята равной $L = 100$ мкм. Сечение дефектообразования $g_{\alpha}(x|\rho)$ было получено с использованием компьютерной программы ID95 [31]. Пороговая энергия смещений E_d выбиралась равной $E_d = 15$ эВ.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

На рисунке 2 представлены результаты расчетов для ионов криптона с энергией 210 МэВ, имплантированных в образец кремния. В качестве подгоночных параметров использовались: энергетический барьер рекомбинации — ΔE_{iv} , параметр s_l (см. выше), радиус трека — R_{tr} и плотность вещества в нем — ρ_{tr} . Результаты численного расчета сильно зависят от этих величин.

В результате фитирования лучшее совпадение экспериментальных и расчетных кривых было получено при следующих значениях этих параметров: $s_l = 0.4$, $R_{tr} = 5.7 \text{ \AA}$, $\rho_{tr} = 1.95 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$ и $\Delta E_{iv} = 0.26$ эВ.

Видно, что результаты вычислений удовлетворительно описывают экспериментальные данные. Имеющиеся различия связаны со значительными упрощениями, введенными в модель. Во-первых, мы рассматривали одномерную задачу. Во-вторых, трек был аппроксимирован цилиндрической областью, хотя радиус трека является функцией глубины проникновения x . В-третьих, в уравнения баланса для точечных дефектов необходимо включить стоки, которыми, несомненно, являются поверхности треков. В компьютерной программе ID95 [31] не учитывается дефектообразование, вызываемое электронными потерями энергии, что также ухудшает

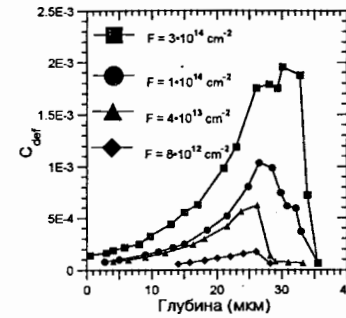


Рисунок 1. Экспериментальная зависимость атомной концентрации дефектов, C_{def} , в образце кремния [111], облученного при комнатной температуре ионами криптона с энергией 210 МэВ до флюенса F , от расстояния до поверхности.

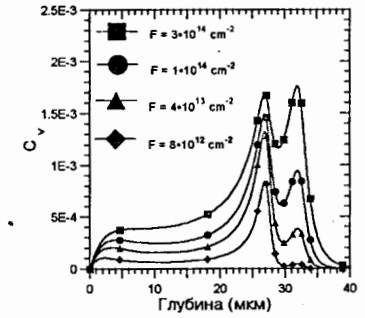


Рисунок 2. Расчетная зависимость атомной концентрации вакансий C_v в образце кремния, облученного при комнатной температуре ионами криптона с энергией 210 МэВ до флюенса F , от расстояния до поверхности.

согласие с экспериментом. По нашему мнению, учет геометрии трека и исследование его роли как источника и стока точечных дефектов может значительно улучшить модель, однако это потребует введения новых параметров.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 095-938-19-23 т.

Литература

- [1] R.L. Fleischer, P.B. Price, R.M. Walker, Nuclear Tracks in Solids (University of California Press, Berkeley, 1975)
- [2] Ю.П. Гангрский, Б.М. Марков и В.П. Перельгин, Регистрация и спектрометрия осколков деления (Энергоатомиздат, 1981).
- [3] Z.G. Wang, Ch. Dufour, E. Paumier, and M. Toulemonde, J. Phys.: Condens. Matter, 6 (1994) 6733.
- [4] A. Dunlop, D. Lesueur, P. Legrand, and H. Dammak, Nucl. Instr. and Meth. B 90 (1994) 330.
- [5] T.P. Ma, and P.V. Dressendorfer, Ionizing Radiation Effects in MOS Devices and Circuits (Wiley Interscience, New York, 1989).

- [6] A.Yu.Didyk, G.G.Gulbekian, W.Wronski, Comparison of radiation effects on the operation of MOS devices under various types of nuclear radiation, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 111 (1996) 84.
- [7] J.F. Ziegler, Nucl. Instr. and Meth. B6 (1985) 270.
- [8] R. Spohr, Ion Tracks and Microtechnology: Principles and Applications (Vieweg, Braunschweig, 1990).
- [9] S. Klaumünzer, Ming-dong Hou, and G. Schumacher, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 850.
- [10] В. С. Вариченко, А. М. Зайцев, В. Ф. Стельмах, В. Д. Ткачев и А. Р. Челидинский, Авторское свидетельство № 1391696 (1988).
- [11] А.Ю. Дидык, В.С. Вариченко, А.М. Зайцев, Сообщения ОИЯИ Р14-95-144 (1995).
- [12] M. Toulemonde, C. Dufour, and E. Paumier, Phys. Rev. B46 (1992) 14362.
- [13] R.L. Fleischer, P.B. Price, R.M. Walker, J. Appl. Phys. 36 (1965) 3645.
- [14] D. Lesueur, and A. Dunlop, Radiat. Eff. Defects Solids 126 (1993) 163.
- [15] A. Dunlop, P. Legrand, D. Lesueur, N. Lorenzelli, J. Morillo, A. Barby and S. Bouffard, Europhys. Lett. 15 (1991) 765.
- [16] W.R. Fahrner, K. Heidemann, and P. Schöttle, Phys. Status Solidi A70 (1982) 463.
- [17] W.R. Fahrner, K. Heidemann, and P. Schöttle, Phys. Status Solidi A71 (1982) 121.
- [18] W.R. Fahrner, D. Bräunig, B.Knoll and J.R. Laschinski, Semiconductor Processing, ASTM STP 850, ed. D.C. Gupta (American Society for Testing and Materials, 1984) 19.
- [19] V.S. Varichenko, A.M. Zaitsev, and V.S. Stelmakch, Phys. Status Solidi A95 (1986) K123.
- [20] A.La Ferla, A.Di Franko, and E. Rimini, Mater. Sci. Eng. B2 (1989) 69.
- [21] A. Kikuchi, N. Naramoto, K. Ozawa, and Y. Kazumata, Nucl. Instr. and Meth. B39 (1989) 724.
- [22] K.G. Oppermann, and W.R. Fahrner, Mater. Sci. Eng. B2 (1989) 75.
- [23] L. Auleybner, J.Pak-Misink, Z. Furmanik, M. Toulemonde, and J. Vetter, Radiat. Eff. Defects Solids 115 (1991) 335.

- [24] A.M. Zaitsev, S.A. Fedotov, A.A. Melnikov, F.F. Komarov, W.R. Fahrner, V.S. Varichenko, and E.H. te Kaat, Nucl. Instr. and Meth. B82 (1993) 421.
- [25] V.A. Martinovich, A.R. Cheliadinskii, V.S. Varichenko, N.M. Penina, E.N. Drozdova, A.M. Zaitsev, and W. Fahrner. In book: Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik bei der DPG, Regensburg 1996, v. 25. b. 29. 1547.
- [26] J. Lindhard, M. Scharff and Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (1963) no. 14.
- [27] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids (Pergamon, New York, 1985).
- [28] S.A. Karamian, Yu.Ts. Oganessian, V.N. Bugrov, Nucl. Instr. and Meth. B43 (1989) 153.
- [29] A.Yu.Didyk, A.M.Zaitsev, S.A.Karamian, JINR Rapid Communications, No 4(37) - 89, Dubna, JINR (1989) 44.
- [30] P.M. Fahey, P.B. Griffin and J.D. Plummer, Rev. Mod. Phys., 61 (1989) 289.
- [31] V.A. Kuzmin, (to be published).

Рукопись поступила в издательский отдел
11 сентября 1996 года.