

РАСЧЕТ ПРОБЕГОВ ИОНОВ ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

*Самаркандский государственный университет им. А. Навои,
Университетский бульвар 15, г. Самарканд, 703029, Узбекистан*

Введение

Карбид кремния считается перспективным материалом для изготовления дискретных приборов, которые должны работать при высоких температурах. Для введения в SiC примесей методом диффузии необходима температура, превышающая 2000⁰С. Поэтому в процессе изготовления приборов на его основе не могут использоваться обычные методы маскирования (SiO₂, Si₃N₄), и отсюда возникает необходимость в других методах легирования карбида кремния.

В последние годы для введения примесей в карбид кремния успешно применяется метод ионной имплантации. Вместе с тем число публикаций по исследованию ионной имплантации в SiC невелико. В основном они посвящены изучению электрических и люминесцентных свойств, а также структуры ионно-легированных слоев [1]. Так, например, в [2] сообщается о наблюдении ферромагнетизма у ионно-имплантированных (Mn⁺, Fe⁺) образцов p-SiC. Авторы работ [3] экспериментально исследовали профиль распределения ионов Mn⁺ и Fe⁺ в SiC, GaN и GaP. Согласно их данным при E = 250 кэВ максимум распределения находится примерно в области ~1300Å. Однако данные пробегов и потерь энергии этих ионов в SiC отсутствуют. Экспериментальные и теоретические данные такого рода стимулируют создание дискретных полупроводниковых приборов и прогнозируют их надежность. Исходя из вышеизложенного можно сказать, что теоретический расчет пробегов и потери энергии ионов переходных элементов в SiC представляют большой практический интерес.

Методика расчета

В работе рассчитаны упругие и неупругие потери энергии, а также пробеги ионов переходной группы, имплантированных в карбид кремния. При изучении радиационных нарушений твердых тел во время легирования полупроводников обычно используются ионы низкой энергии. Однако теоретических и экспериментальных данных энергии ионов меньше 10⁶ эВ недостаточно. Это связано со сложностью потенциальной энергии взаимодействия частиц. До настоящего времени неизвестен и точный вид потенциала, который описывал бы взаимодействие падающих ионов и мишени. Кроме того, только для потенциалов типа кулоновского и степенного задача полностью разрешима. При использовании реальных потенциалов задача не поддается аналитическому расчету. Поэтому часто реальный потенциал, для которого необходимо определить сечение взаимодействия, аппроксимируют более простым. Это не всегда приводит к точному решению поставленной задачи.

Исследования, проведенные Линхардом–Шарффом–Шиоттом (ЛШШ) [4], значительно увеличили объем сведений о прохождении ионов низких энергий через тормозящие среды. Поэтому при расчете пробегов медленных ионов в твердых телах широко используется теория ЛШШ. Однако полученные в последние годы экспериментальные данные пробегов медленных ионов [5, 6] существенно превышают теоретические значения [4]. В частности, в работе [5] установлено, что проецированные пробеги тяжелых ионов (Z₁=54–83, энергия иона 20–100 кэВ) в кремнии и алюминии оказываются значительно больше (примерно на 30–50%) предсказуемых теорией ЛШШ.

Фирсов [7] показал, что взаимодействие атомов на расстоянии r < 10⁻⁸ см точно описывается потенциалом

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \cdot \chi(x), \quad (1)$$

где $x = \frac{r \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{2/3}}{a_{\text{ТФ}}}$; $\chi(x)$ – функция экранирования Томаса–Ферми, $a_{\text{ТФ}} = 0,47 \cdot 10^{-8}$ см – характеристический размер атома в модели Томаса–Ферми. Z_1 и Z_2 – атомные номера иона и атома тормозящей среды.

Поскольку функция экранирования $\chi(x)$ табулирована, для практического применения большой интерес представляет ее приближенный аналитический вид. Так, при расчетах Линхард и др. [4] в качестве аппроксимирующего потенциала Фирсова использовали выражение типа

$$U(r) = \frac{0,831 \cdot Z_1 Z_2 e^2}{2 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \cdot \frac{a_{\text{ТФ}}}{r^2}. \quad (2)$$

Этот потенциал отличается от потенциала (1) при значениях аргумента $3,8 < x < 1,2$. Расхождение особенно заметно для тяжелых ионов. Например, при $Z_1 = Z_2 = 60$ значение потенциала (2) в 1,5 раза больше потенциала (1) при $r = 0,6$ Å, а при $r = 0,85$ Å больше в два раза. Такое расхождение должно приводить к большим значениям сечений рассеяния и упругих потерь энергии.

Титц [8], решая уравнения Томаса–Ферми вариационным методом, получил

$$U(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 e^2}{r} \cdot \left[\frac{1,7566}{1,7566 + x} \right]^2. \quad (3)$$

Выражение (3) хорошо описывает потенциал взаимодействия атомов при $x < 30$. Максимальное отклонение от значения потенциала (1) не превышает $\pm 8\%$.

Для потенциала (2) упругие потери энергии ионов имеют вид

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_n \cdot \frac{10^{16}}{N} = \frac{2,8\pi^2 Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \cdot \frac{M_1}{M_1 + M_2}, \quad (4)$$

где M_1 , M_2 – массы иона и атома среды, N – число атомов в 1 см^3 тормозящей среды.

В теории ЛШШ неупругие потери энергии ионов вычисляются по формуле

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e \cdot \frac{10^{16}}{N} = A \cdot E^{1/2}, \quad (5)$$

где

$$A = \frac{0,3832\pi \cdot Z_1^{7/6} Z_2}{M_1^{1/2} \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2}}. \quad (6)$$

С помощью формул (4) и (5) полный пробег иона определяется из уравнения

$$R = \frac{2 \cdot 10^{16}}{N} \cdot \left\{ \frac{E^{1/2} - E_d^{1/2}}{A} - \frac{C}{A^2} \ln \left| \frac{C + A \cdot E^{1/2}}{C + A \cdot E_d^{1/2}} \right| \right\}, \quad (7)$$

где $E_d \approx 25$ эВ – минимальная энергия, а значения A устанавливаются из выражения (6):

$$C = \frac{2,8\pi^2 Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \cdot \frac{M_1}{M_1 + M_2}. \quad (8)$$

В работе [9] показано, что при использовании потенциала [4] упругие потери энергии ионов достаточно хорошо аппроксимируются следующими выражениями:

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_n \cdot \frac{10^{16}}{N} = C_1 \cdot E^{1/5}, \quad (9)$$

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n \cdot \frac{10^{16}}{N} = C_2 \cdot \frac{1}{E} \cdot \ln \left| \frac{E_2 + \sqrt{\lambda} \cdot E}{E_2 + \sqrt{E \cdot E_0}} \right| + C_3 \cdot \frac{E_0^{3/5} - E_d^{3/5}}{E^{2/5}}, \quad (10)$$

где

$$C_1 = \frac{7,90\pi\gamma Z_1^{5/6} Z_2^{5/6}}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{16/15}} \cdot \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2}\right)^{4/5} \cdot \left(\frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\right)^{1/5};$$

$$C_2 = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{2,56 \cdot 10^{-24}} \cdot \frac{M_1}{M_2} \cdot 10^{16}; \quad \lambda = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}; \quad \gamma \approx 1,05;$$

$$C_3 = \frac{4,75\pi\gamma Z_1^{5/6} Z_2^{5/6}}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{16/15}} \cdot \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^{2/5}; \quad E_0 \approx \frac{\sqrt{Z_1 \cdot Z_2}}{1,5} \cdot 10^3 \text{ эВ}; \quad E_2 = \frac{8}{\pi} \cdot \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{a_{\text{тф}}} \cdot \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3} \cdot \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^{1/2};$$

$$E_d \approx 25 \text{ эВ}.$$

В работе [10] вычислены неупругие потери энергии частиц с учетом скорости орбитальных электронов атомов тормозящей среды. Установлено, что при малых скоростях, то есть когда скорость иона $v \ll u_i$, неупругие потери энергии ионов определяются по формуле

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = A_1 \cdot E^{1/2}, \quad (11)$$

где

$$A_1 = \frac{2\sqrt{2}\pi Z_1^2 e^4}{\sqrt{M_1} \cdot m} \cdot N \cdot \sum_{i=1} n_i \alpha_i K_0(\alpha_i) K_1(\alpha_i) U_i^3, \quad (12)$$

n_i , U_i – число и скорость электронов на i -й оболочке атома соответственно; m – масса электрона; Z_1 , M_1 – атомный номер и масса иона соответственно; $K_0(\alpha)$, $K_1(\alpha)$ – функции Макдональда. Суммирование проводится по всем оболочкам атома тормозящей среды, а значения α_i определяются из соотношения $\alpha_i \exp(\alpha_i) = \frac{Z_1 e^2}{\lambda \cdot a_D U_i^2 m}$. Здесь $\lambda \sim 1$ – параметр, учитывающий ионизованное состояние налетающих частиц; $a_D = \left[\frac{3}{64} \cdot \frac{(3\sqrt{\pi})^{2/3} \cdot a_0}{n^{1/3}} \right]^{1/2}$ – радиус экранирования Дебая–Хьюккеля, n – число электронов в 1 см³ тормозящей среды, $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см – боровский радиус водорода.

Результаты расчета и выводы

Упругие и неупругие потери энергии ионов Mn^+ и Co^+ в карбиде кремния рассчитали по формулам (9), (10) и (11). При этом предполагали, что плотность SiC $\rho = 3,2128$ г/см³, радиус экранирования Дебая–Хьюккеля $a_D = 0,295 \cdot 10^{-8}$ см, и не учитывали ионизованное состояние налетающих частиц, то есть предполагали, что $\lambda = 1$. Однако такое предположение справедливо лишь при низких энергиях. Установлено, что значения параметра A , вычисленного по формуле (5), примерно на 10% больше значения параметра A_1 , вычисленного по формуле (11) для ионов Mn^+ и Co^+ .

На основе формул (9), (10) и (11) пробеги ионов Mn^+ и Co^+ определены численным методом. Значения R_L рассчитаны с помощью уравнения (7). Эти результаты приведены в таблице. Из нее видно, что при низких энергиях пробеги ионов, рассчитанные по теории ЛШШ, очень отличаются (30–40%) от пробегов, рассчитанных численным методом с использованием формул (9), (10) и (11). С увеличением энергии налетающих частиц это различие уменьшается. При энергиях $E = 100$ кэВ для ионов Mn^+ и Co^+ оно изменяется от 3,5 до 7,5 %.

Упругие и неупругие потери энергии, а также пробеги ионов Mn^+ и Co^+ в карбиде кремния

Энергия, $E, \text{кэВ}$	$Mn^+ \rightarrow SiC$				$Co^+ \rightarrow SiC$			
	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n \cdot 10^{-8}$ по (9)–(10)	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \cdot 10^{-8}$ по (11)	$R, \text{Å}$ по чис- ленным методам	$R_{ЛШШ}, \text{Å}$ по (7)	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n \cdot 10^{-8}$ по (9)–(10)	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \cdot 10^{-8}$ по (11)	$R, \text{Å}$ по чис- ленным методам	$R_{ЛШШ}, \text{Å}$ по (7)
10	119,71	12,78	94,89	72,21	125,20	12,90	91,35	65,41
20	135,90	18,07	164,71	143,30	143,87	16,84	158,50	129,72
40	134,33	25,56	292,16	274,0	144,62	23,82	280,08	250,60
60	129,91	31,30	416,73	401,71	142,74	29,67	397,63	368,81
80	125,19	36,15	540,75	525,14	136,55	33,69	514,67	482,28
100	120,79	40,41	664,77	644,0	132,47	37,66	632,14	588,12
200	110,97	57,15	1288,14	1199,8	114,47	53,26	1224,26	1103,74

В работе [5] измерены пробеги низкоэнергетических ($E = 1-60$ кэВ) ионов As^+ , Ge^+ , Se^+ и Bi^+ в кремнии, алюминии и германии. Во всем исследованном диапазоне энергий экспериментальное значение пробега $R_{эксн}$ больше, чем $R_{ЛШШ}$, на 30% при $\epsilon = 0,1$ и до 100% при $\epsilon = 0,001$. Здесь ϵ – безразмерный энергетический параметр в теории ЛШШ. Таким образом, можно предположить, что пробеги низкоэнергетических ионов, рассчитанные с помощью формул (9), (10) и (11), лучше согласуются с экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев В. М., Демаков К. Д., Косаганова М. Г., Рейфман М. Б., Столярова В. Г. Исследование электролюминесценции кристаллов α -SiC, ионно-легированных бором, алюминием и галлием // Физика и техника полупроводников. 1975. Т. 9.6.7. С. 1238–1242.
2. Theodoropoulou N., Hebard A. F., Chu S. N. G., Overberg M. E., Abernathy C. R., Pearton S. J., Wilson R. G. and Zavada J. M. Magnetic Properties of Fe – and Mn – Implanted SiC // Electrochemical and Solid State Letters. 2001. 4 (12), G119-G121.
3. Pearton S.J., Park Y.D., Abernathy C.R., Overberg M.E., Thaler G.T., Kim Jihyun and Ren F. GaN and Other Materials for Semiconductor Spintronics // Journal of Electronic Materials. 2003. V.3. P. 288–297.
4. Linhard J., Scharff M., Schiott H. E. Range concepts and heavy ion ranges // Mat. Fys. Med. Kgl. Danske Vid selskab. 1963. V.33. №14. P. 1–42.
5. Oetzmann H., Feuerstein A., Grahman H. and Kalbitzer S. Range parameters of heavy ions in amorphous targets at LSS-energies of $0,0006 \leq \epsilon \leq 0,3$ H Phys. Letters. 1975. V.55A. P. 170–172.
6. Oetzmann H., Feuerstein A., Grahman H. and Kalbitzer S. Range parameters of heavy ions in silicon and germanium with reduced energies from $0,001 \leq \epsilon \leq 10$ // Ion Beam Surface Layer Anal. Vol.1, New York–London, 1976. P. 245–254.
7. Фирсов О. Б. Вычисление потенциала взаимодействия атомов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1957. Т.33. № 3. С. 696–699.
8. Tietz T. An improved approximate analytic solution of the Thomas-Fermi Equation of atoms // Nuovo cimento. 1955. V.1. № 5. P. 955.
9. Yarkulov U. Range of heavy ions in solids // Rad. Effects. 1984. V.83. № 4. P. 233–239.
10. Яркулов У. Неупругие потери энергии медленных ионов в твердых телах // Изв. АН УзССР. Сер. физ.–мат. наук. 1970. № 2. С. 69–72.

Поступила 15.02.06

Summary

In the present paper we obtained approximated expressions for calculation of elastic losses of energy for low-energy heavy ions in solids by using the Thomas–Fermi–Firsov potential. It was revealed that the elastic losses of energy for low-energy ions are not constant. With rising energy E of ion the elastic energy losses increase, and at certain energy they reach maximal value. At further rise of E the elastic energy losses of ion decrease slowly. The elastic energy losses of ions Mn^+ and Co^+ were calculated for SiC. The ranges of heavy ions (Mn^+ and Co^+) in SiC were calculated in the energy range $10 \div 200$ keV. It was shown that at low energies ($E \leq 20$ keV) the ranges of ions exceed on 30–40% those determined by the LSS (Linhard–Scharff–Schiott) theory. With rising energy of ion the discrepancy decreases to 3–7%.